Τελική Έκθεση Πεπραγμένων και Μελλοντικής Συνεργασίας

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Δράση 1: Συντονισμός Έργου 4
1.1 Σκοπός & Προγραμματισμός Υλοποίησης από το ΤΔΥ 4
1.2 Απολογισμός Πεπραγμένων 5

2 Δράση 2: Αριθμητικές και Αναλυτικές Μέθοδοι για Ασυνεχή Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων 7
2.1 Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation 7
2.2 Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ 10
2.3 Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι 12
2.4 Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά 14

3 Δράση 3: Υλοποίηση σε Σύγχρονα Υπολογιστικά Περιβάλλοντα 17
3.1 Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές 17
3.2 Υλοποίηση σε FPGAs και Πολυπύρηνα Συστήματα (Multicores, Manycores) 20

4 Δράση 4: Συγκερασμός και Επικύρωση 22
4.1 Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού 22
4.2 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής 25
4.3 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής 27

5 Δράση 5: Αξιολόγηση 30

6 Δράση 6: Διάχυση Αποτελεσμάτων 30
6.1 Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια 31
6.2 Διοργάνωση Επιστημονικών Ημερίδων 33
6.3 Ανάπτυξη Ιστοσελίδας 33

7 Δημοσιεύσεις 35

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ 39

Α΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1 40

Β΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2 84

Γ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3 114

Δ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4 141

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ε΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1 171

ΣΤ΄Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2 205

Ζ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1 242

Η΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 299

Θ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3 336

Ι΄ Τελική Έκθεση Αξιολόγησης 376

ΙΑ΄Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 6 406

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Δράση 1: Συντονισμός Έργου

1.1 Σκοπός & Προγραμματισμός Υλοποίησης από το ΤΔΥ

Συντονιστής: Ι. Σαριδάκης / Πολυτεχνείο Κρήτης / Γενικό Τμήμα

Διάρκεια: 45 μήνες (Σημείωση: Τροποποιήθηκε σε 47)

Έναρξη: 1/1/2012 (Σημείωση: Πράξη Ένταξης του έργου 26/6/2012)

Εκτιμώμενη Λήξη: 30/9/2015 (Σημείωση: Τροποποιήθηκε σε 30/11/2015)

Σύντομη περιγραφή: Σκοπός του συγκεκριμένου ΠΕ είναι ο συντονισμός παρούσας πράξης έτσι ώστε να επιτευχθούν οι επιμέρους στόχοι που έχουν τεθεί και να υλοποιηθεί το σύνολο των παραδοτέων.

Περιγραφή και Υλοποίηση: Το ρόλο του Συντονιστή του έργου αναλαμβάνει ο Καθηγητής Ι. Σαριδάκης, υπεύθυνος της 1ης ερευνητικής ομάδας (Πολυτεχνείο Κρήτης). Ο Συντονιστής του έργου σε συνεργασία με τους υπεύθυνους των δύο άλλων ερευνητικών ομάδων καθηγητές Η. Χούστη και Σ. Λυκοθανάση (αντικατέστησε τον Θ. Παπαθεοδώρου) παρακολουθούν το φυσικό και οικονομικό αντικείμενο, το συντονισμό των εργασιών των τριών συνεργαζόμενων ερευνητικών ομάδων καθώς και τη σύνταξη των αναλυτικών ετήσιων εκθέσεων προόδου. Οι ετήσιες εκθέσεις θα περιλαμβάνουν την πορεία της έρευνας και τις επιστημονικές δραστηριότητες που έλαβαν χώρα κατά την υλοποίηση του έργου. Με τη λήξη της έρευνας, ο Συντονιστής θα υποβάλλει -σε συνεργασία με όλα τα μέλη της ΚΕΟ- την Τελική Έκθεση Πεπραγμένων και Μελλοντικής Συνεργασίας όπου θα επισυνάπτονται περιλήψεις όλων των παραδοτέων (επιστημονικών δημοσιεύσεων, περιγραφή πακέτων λογισμικού και οδηγίες χρήσης) που θα προκύψουν από το έργο. Η κεντρική ερευνητική ομάδα αποτελούμενη από όλα τα μέλη ΔΕΠ που συμμετέχουν στο προτεινόμενο ερευνητικό πρόγραμμα θα συνεδριάζει κάθε έτος του προγράμματος με στόχο την ανασκόπηση της πορείας του προγράμματος και την συζήτηση και σχολιασμό των ενεργειών που σύμφωνα με τον προγραμματισμό του έργου θα πραγματοποιούνται μέσα στο επόμενο έτος. Θα επισημαίνει προβλήματα που προέκυψαν κατά την υλοποίηση του προγράμματος και θα προτείνει μέτρα για την επίλυσή τους και την αποφυγή επανάληψής τους στο μέλλον. Οι συναντήσεις αυτές θα ενισχύσουν ταυτόχρονα την επιστημονική επικοινωνία και συνεργασία των ερευνητών του έργου, και, μαζί με τις συναντήσεις του Συντονιστή και τους Υπεύθυνους των ομάδων εργασίας, θα αποτελούν το φυσικό κέντρο μελλοντικού σχεδιασμού συγκεκριμένων επιστημονικών δράσεων με στόχο την συνέχεια και επέκταση της συνεργασίας των τριών

ομάδων και τη δημιουργία εθνικού δικτύου επιστημονικού υπολογισμού. Αναμένεται να πραγματοποιηθούν συνολικά τέσσερις (4) συναντήσεις, εκάστη διάρκειας τουλάχιστον δύο ημερών, που θα πραγματοποιηθούν στα Χανιά, έδρα του Πολυτεχνείου Κρήτης, και στο Βόλο, έδρα Πανεπιστήμιου Θεσσαλίας. Τα έξοδα μετακινήσεων του συντονιστή και των μελών της ΚΕΟ στις συγκεκριμένες συναντήσεις έχουν ληφθεί υπόψη στον προϋπολογισμό του έργου. Επιπλέον των παραπάνω δράσεων ο Συντονιστής θα έχει εξαμηνιαίες συσκέψεις με του υπευθύνους των ερευνητικών ομάδων για την ανασκόπηση των διμερών συνεργασιών όσο αφορά τόσο το φυσικό όσο και οικονομικό αντικείμενο και την επίλυση των επιμέρους προβλημάτων, αλλά, όπως αναφέρουμε και παραπάνω, και το σχεδιασμό δράσεων για την συνέχεια και επέκταση της συνεργασίας των τριών ομάδων και τη δημιουργία εθνικού δικτύου επιστημονικού υπολογισμού. Το κόστος των μετακινήσεων του συντονιστή και των υπευθύνων των ΚΕΟ έχει ληφθεί υπ' όψιν στον προϋπολογισμό του έργου.

Παραδοτέα:

1.1 1η Ετήσια Έκθεση Προόδου

1.2 2η Ετήσια Έκθεση Προόδου

1.3 3η Ετήσια Έκθεση Προόδου

1.4 Τελική Έκθεση Πεπραγμένων και Μελλοντικής Συνεργασίας

1.2 Απολογισμός Πεπραγμένων

Κατά τη διάρκεια του έργου, σύμφωνα με το προγραμματισμό του ΤΔΥ, διοργανώθηκαν επτά (7) τακτικές συναντήσεις εργασίας του συντονιστή και των υπευθύνων των ΚΕΟ με αντικείμενο την παρακολούθηση της πορείας εξέλιξης του φυσικού και οικονομικού αντικειμένου, τον συντονισμό των ερευνητικών συνεργασιών, καθώς και τη διευθέτηση και επίλυση εκτάκτων διοικητικής φύσεως θεμάτων. Μέσω των συναντήσεων αυτών, οι οποίες αποτυπώνονται συνοπτικά στον σχετικό πίνακα που ακολουθεί, αλλά και της συχνής έκτακτης επικοινωνίας των υπευθύνων των ομάδων, επετεύχθη η παρακολούθηση του έργου και ο συντονισμός των εργασιών των τριών ερευνητικών ομάδων. Παράλληλα ο επιστημονικός υπεύθυνος και συντονιστής του έργου είχε συχνή επικοινωνία και υποστήριξη από στελέχη του ΕΛΚΕ Πολυτεχνείου Κρήτης αλλά και στελέχη της Ειδικής Διαχειριστικής Αρχής (ΕΥΔ) Ε.Π. "Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση" για την πλήρη τήρηση των κανόνων διαχείρισης του προγράμματος "ΘΑΛΗΣ".

Για την παρακολούθηση και τον συντονισμό του ερευνητικού έργου διοργανώθηκαν τρεις (3) τακτικές και έξι (6) διμερείς ερευνητικές συναντήσεις, οι οποίες

ΤΑΚΤΙΚΕΣ ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΤΩΝ		
Α/Α	ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ
1η	Πολυτεχνείο Κρήτης	Ιούλιος 2012
2η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Απρίλιος 2013
3η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Νοέμβριος 2013
4η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Μάιος 2014
5η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Δεκέμβριος 2014
6η	Πανεπιστήμιο Πατρών	Μάιος 2015
7η	Πανεπιστήμιο Πατρών Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Οκτώβριος 2015

αποτυπώνονται στους πίνακες που ακολουθούν. Στις τακτικές συναντήσεις συμμετείχαν όλα τα μέλη των ερευνητικών ομάδων που παρουσίασαν με λεπτομέρεια την πρόοδο του φυσικού αντικειμένου και την εξέλιξη ολοκλήρωσης των παραδοτέων όλων των δράσεων. Επίσης σχεδίαζαν και προγραμμάτιζαν τα επόμενους ερευνητικούς στόχους και τα βήματα που πρέπει να ακολουθηθούν.

ΤΑΚΤΙΚΕΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΕΣ ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΚΕΟ / ΟΕΣ			
Α/Α	ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ
1η	Πολυτεχνείο Κρήτης	Ιούλιος 2012	10
2η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Ιούλιος 2013	18
3η	Πολυτεχνείο Κρήτης	Ιούλιος 2014	9

ΔΙΜΕΡΕΙΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΕΣ ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΚΕΟ / ΟΕΣ			
Α/Α	ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΚΕΟ /ΟΕΣ
1η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Νοέμβριος 2013	1 , 2 , 3
2η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Μάιος 2014	1 , 2 , 3
3η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Δεκέμβριος 2014	1 , 2 , 3
4η	Πανεπιστήμιο Πατρών	Μάιος 2015	1 , 2 , 3
5η	Πανεπιστήμιο Πατρών	Οκτώβριος 2015	1 , 3
6η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Οκτώβριος 2015	1 , 2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Οι διμερείς συναντήσεις εστίαζαν σε ερευνητικά θέματα συνεργασίας των ερευνητικών ομάδων με ένταση στον καθορισμό μεθοδολογίας επίλυσης συγκεκριμένων ερευνητικών προβλημάτων. Εξαιρετικά συχνή ήταν επίσης και η επικοινωνία των ερευνητικών ομάδων μέσω τηλεδιάσκεψης για την παρακολούθηση της προόδου, τον προγραμματισμό και την επίλυση ερευνητικών θεμάτων.

Οι συχνές ερευνητικές συναντήσεις επέδρασαν αποτελεσματικά στην επιστημονική όσμωση των ερευνητικών ομάδων και στην αρμονική συνεργασία τους, καθώς και στην ώριμη διεπιστημονική αντιμετώπιση πολλών πολύπλοκων προβλημάτων. Είχαν δε ως άμεσο αποτέλεσμα την παραγωγή πολλαπλάσιου ερευνητικού έργου από αυτό που είχε κατ' αρχήν προγραμματιστεί, αλλά κυρίως έθεσαν στέρεες βάσεις για την βέβαιη μελλοντική ερευνητική συνεργασία τους καθώς και της μελλοντικής δημιουργίας ερευνητικού δικτύου επιστημονικού υπολογισμού.

Τα συνολικά παραδοτέα της δράσης, σύμφωνα με το ΤΔΥ, που έχουν ολοκληρωθεί είναι:

1.1 Ετήσια Έκθεση Προόδου 2012

1.2 Ετήσια Έκθεση Προόδου 2013

1.3 Ετήσια Έκθεση Προόδου 2014

1.4 Τελική Έκθεση Πεπραγμένων και Μελλοντικής Συνεργασίας (2015)

2 Δράση 2: Αριθμητικές και Αναλυτικές Μέθοδοι για Ασυνεχή Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων

Σκοπός της παρούσας δράσης, όπως αναφέρεται στο ΤΔΥ, είναι η ανάπτυξη και μελέτη αριθμητικών και αναλυτικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ), οι οποίες χαρακτηρίζονται από ασυνεχείς συντελεστές και αναφέρονται σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων. Η υλοποίησή της πραγματοποιείται από τέσσερις διαφορετικές δράσεις (2.1, 2.2, 2.3 και 2.4), ανάλογα με την κατηγορία μεθόδων επίλυσης που χρησιμοποιούνται, των οποίων η περιγραφή και η πρόοδος που επετεύχθη την τρέχουσα περίοδο ακολουθεί.

2.1 Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation

Σκοπός της δράσης 2.1 είναι η ανάπτυξη και μελέτη ορθογώνιων ή spline collocation μεθόδων για την επίλυση μη-κλασικών ΜΔΕ (multiphysics, multidomain) και η αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές, αλλά και η κατανόηση της

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επίδρασης των ασυνεχειών αυτών στην συμπεριφορά της μεθόδου collocation όσον αφορά τον βαθμό σύγκλισης και την ευστάθεια της μεθόδου, καθώς και της κατάστασης των αντίστοιχων γραμμικών συστημάτων. Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια δράσεων 3 και 4).

Στην κατεύθυνση αυτή, κεντρική ενέργεια της δράσης απετέλεσε η εισαγωγή και ανάπτυξη μίας νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου (Derivative Discontinuous Hermite Collocation - dDHC) για την επίλυση Προβλημάτων Αρχικών και Συνοριακών Συνθηκών Πολλαπλών Πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ). Η νέα dDHC μέθοδος, σε συνδυασμό με υψηλής ευστάθειας και τάξης κατάλληλα χρονικά σχήματα Runge-Kutta, εφαρμόστηκε σε γραμμικά και μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις και μελετήθηκε η τάξη σύγκλισής της.

Πιο συγκεκριμένα, όπως αναφέρεται και στη Τελική Τεχνική Έκθεση της παρούσας δράσης, τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα που παρήχθησαν κατά τη διάρκεια του έργου περιλαμβάνουν:

- Ανάπτυξη απαραίτητων βασικών μαθηματικών εργαλείων, όπως:
  - Νέα κυβικά πολυώνυμα Hermite με ασυνεχή παράγωγο στις διεπαφές (derivative Discontinuous Hermite Cubic polynomials)
  - Νέοι Βασικοί Collocation Πίνακες (Elemental Collocation Matrices - ECM) για την εισαγωγή και ανάπτυξη της νέας μεθόδου Collocation με ασυνεχή Hermite στοιχεία (derivative Discontinuous Hermite Collocation - dDHC)
  - Kronecker Γινόμενα για την ανάπτυξη της dDHC στις 2 χωρικές διαστάσεις
  - Γινόμενα Hadamard για την παραγωγή του σχετικού συστήματος Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ) της dDHC για μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.
  - Γενικευμένες πολυωνυμικές συναρτήσεις για την Προσέγγιση του Συντελεστή Διάχυσης σε προβλήματα στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες σε εσωτερικές γωνίες του πεδίου ορισμού.
- Ανάπτυξη της dDHC μεθόδου για:
  - Γενικευμένα γραμμικά και μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις (χρήση Hadamard γινομένων)
  - Γενικευμένα γραμμικά και μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, στις 1+2 διαστάσεις (χρήση Hadamard/Kronecker γινομένων)

  - Γενικευμένα γραμμικά και μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, με γωνιακές ασυνέχειες, στις 1+2 διαστάσεις

- Ανάπτυξη Hermite Collocation για παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, μέσω της προσέγγισης του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα κυβικά πολυώνυμα
- Ανάπτυξη υβριδικής Hermite Collocation, μέσω του συνδυασμού της με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ), για προβλήματα ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις
- Ανάπτυξη και μελέτη παράλληλων αλγόριθμων για την επίλυση ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις από την dDHC, σε συνδυασμό με Runge-Kutta χρονικά σχήματα, και απεικόνισή τους σε υπολογιστικές αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης με γραφικούς επιταχυντές (GPUs).

Τα παραδοτέα της Δράσης αυτής αποτελούνται από:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 5 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών επιστημονικών συνεδρίων, εκ των οποίων δυο πήραν το βραβείο καλύτερης δημοσίευσης:

  1. IE Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013, Vol I, pp 241-246, WCE-ICAEM 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.
  2. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and IMEX Runge-Kutta for a Treated Quasi-linear Heterogeneous Brain Tumor Model, Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 183-188, 2015
  3. EN Mathioudakis, ND Vilanakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Parallel Iterative Solution of the Hermite Collocation Equations on GPUs, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol II, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K. (Best Paper Award)
  4. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015, Vol I, pp. 137-142, WCE-ICAEM 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

5. N. Vilanakis and E. Mathioudakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs II, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012097

- Έχει κατατεθεί ένα άρθρο σε διεθνές επιστημονικό περιοδικό.
- Παραδόθηκε και είναι διαθέσιμο προς χρήση από κάθε ενδιαφερόμενο, το παραγόμενο λογισμικό επαλήθευσης και εφαρμογής των μεθόδων.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Τελική Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.1, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Α'.

2.2 Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ

Σκοπός της παρούσας δράσης, όπως αναφέρεται στο ΤΔΥ, είναι κυρίως η δημιουργία και μελέτη νέων προχωρημένων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή κατάλληλες για προβλήματα με σύνθετες ΜΔΕ και ιδιαίτερα κατάλληλες για την αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές τους. Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια υποέργων 3 και 4).

Κατά τη διάρκεια του έργου τα παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Ανασκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων (multi-domain, multi-physics problems, MDMP problems).
- Ανασκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα.
- Έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη-κανονικά πεδία.
- Έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ με ασύγχρονη συμπεριφορά.
- Έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου.

Οι αλγόριθμοι υλοποιήθηκαν σε δυο διαφορετικά περιβάλλοντα, σε Matlab και σε FENICS. Η δεύτερη περίπτωση περιγράφεται αναλυτικά στις Δράσεις 3 και 4.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα παραδοτέα της Δράσης 2.2, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν τα εξής 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών επιστημονικών συνεδρίων και επιστημονικών περιοδικών:
  - M. Vavalis, M. Mu, G. Sarailidis, Finite element simulations of window Josephson junctions, J Comp Applied Math, 236, pp3186-3197, 2012
  - P. Tsompanopoulou, Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, 6th International Conference on Numerical Analysis(NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece. pp 260-265.
  - A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis, An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems, International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), Rhodes, Greece, Sept. 23-29, 2015.

  Σχετικές δημοσιεύσεις που είναι αποτέλεσμα της συνεργασίας μεταξύ των ερευνητικών ομάδων του έργου και παραδίδονται ως παραδοτέα άλλων δράσεων περιλαμβάνουν:

  - Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method, 6th International Conferenceon Numerical Analysis (NUMAN2014), A.Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp167-173.
  - IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs, A.Korfiati, N. Sfika, K. Daloukas, C. Alexakos, P. Tsompanopoulou, S.Likothanassis, The 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC 215), July 1-3, 2015, London, U.K.
  - An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain/Multi-physics Problems, A. Korfiati, S. Likothanassis, P. Alefragis, K. Daloukas, P. Tsompanopoulou, 13th International Conference of Numerical Analysis & Applied Mathematics, Sept 23-29, 2015, Rhodes. Greece.
- Πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων:
  - Προσθήκες σε πλατφόρμα FENICS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Προσθήκες σε πλατφόρμα FENICS για την εύρεση των interface points σε μη κανονικές γεωμετρίες με χρήση των KD trees.
- Προσθήκες σε πλατφόρμα FENICS για τη δημιουργία γραφικών παραστάσεων των λύσεων στο αρχικό χωρίο του προβλήματος.

Στα πλαίσια αυτής της Δράσης, συνεργάστηκαν μέλη από όλες τις ερευνητικές ομάδες με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας) ως εξής:

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (cloud)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (distrib)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (asynch)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO με Collocation	X	X	
Υλοποίηση Μεθόδου GEO - Κάλυμνος	X	X	X

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.2, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Β'.

2.3 Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι

Η Δράση 2.3 στοχεύει στην ανάπτυξη υβριδικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ οι οποίες θα αποτελούνται από τον συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo, για να κατατμήσει το αρχικό σύνθετο πρόβλημα ΜΔΕ σε ένα σύνολο πλήρως ανεξάρτητων μεταξύ τους υπο-προβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων διαφορών) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων των υπο-προβλημάτων. Αισιοδοξούμε ότι θα μπορέσουμε να δημιουργήσουμε ένα γενικό πλαίσιο για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων (και όχι μόνον) αλλά και ένα πρακτικό εργαλείο για την προσομοίωσης τους. Η υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, διότι, πέρα από τον εγγενή παραλληλισμό των στοχαστικών μεθόδων, τα εν λόγω σχήματα έχουν διάφορα επιπρόσθετα ελκυστικά χαρακτηριστικά όσο αφορά την δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα (multithreading, cluster, web services, κ.λ.π.).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα κύρια παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα της δράσης συνοψίζονται ως εξής:

- Μελέτη στοχαστικούς αριθμητικών λυτών (μέθοδοι απλού τυχαίου περιπάτου σε σφαίρες ή συνέργειες των συμβατικών μεθόδων επίλυσης ντετερμινιστικών ΜΔΕ προβλημάτων και των παραδοσιακών πιθανολογικών Μόντε Κάρλο προσεγγίσεων) για ντετερμινιστικά ελλειπτικά προβλήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων(ΜΔΕ) που χαρακτηρίζονται από την multi-domain ή/και την multi-physics φύση τους.
- Ανάπτυξη γενικής μεθοδολογίας στοχαστικών λυτών και διατύπωσή της μέσω ενός γενικού αλγορίθμου.
- Τεχνικές / πειράματα υλοποίησης στοχαστικών λυτών.

Τα παραδοτέα της Δράσης 2.3, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 4 επιστημονικά άρθρα σε διεθνή περιοδικά και σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων.
  - Manolis Vavalis, Real Valued Block SOR Iterative Methods for the Helmholtz Equation, Intern. J Num. Methods & Appl., 10(3), 99-126, 2013
  - Manolis Vavalis and Giorgos Sarailidis, On the Stochastic/Deterministic Numerical Solution of Composite Deterministic Elliptic PDE Problems, Inter. J of Math.l Models and Methods in Applied Science, 9, 740-747, 2015
  - E. Maroudas, N. Vilanakis, Ch. Antonopoulos, E. Mathioudakis, Y. Saridakis and M. Vavalis, Schwarz Splitting For The Steady State Problem Of Saltwater Intrusion In Coastal Aquifers, Inter. J of Math.l Models and Methods in Applied Science, 9, 733-739, 2015
  - Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, and Panayiotis Bozanis, A Study of Sparse Matrix Methods on New Hardware: Advances and Challenges, International Journal of Monitoring and Surveillance Technologies Research (IJMSTR), in press

  Σχετικές δημοσιεύσεις που παραδίδονται ως παραδοτέα άλλων δράσεων περιλαμβάνουν:

  - Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, ”On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems”, Journal of Mathematics and Statistical Science. Accepted 10/2015, in press.
  - P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, “Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains”, Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.
  - A. Korfiati, S. Likothanassis, P. Alefragis, K. Daloukas, P. Tsompanopoulou, An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain/Multi-physics Problems, 13th International Conference of Numerical Analysis & Applied Mathematics,Sept 23-29, 2015, Rhodes, Greece.

- Το παραγόμενο λογισμικό που βρίσκεται στους ιστοχώρους:
  - $https://github.com/mvavalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers$
  - $https://github.com/mvavalis/multidomain_multiphysics$
  - Ιστοσελίδα του έργου

Στη δράση αυτή αναπτύχθηκαν εντατικές, αμφίπλευρες και εκτενείς συνεργασίες με όλα σχεδόν τα μέλη της ομάδας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας και του Πολυτεχνείου Κρήτης καθώς και μονόπλευρη συνεργασία με μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Πάτρας. Αναπτύχθηκαν επίσης συνεργασίες με εξωτερικά μέλη από Ελλάδα και εξωτερικό, που δεν υπάγονται στο ερευνητικό έργο.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.3, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Γ’.

2.4 Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά

Αντικείμενο της παρούσας δράσης αποτελεί η μελέτη και προσαρμογή της μεθόδου μετασχηματισμού-Φωκά για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές. Στην διαδικασία αυτή περιλαμβάνεται η ανάπτυξη αναλυτικών ή αριθμητικών μεθόδων επίλυσης των γενικευμένων συνθηκών ή των αντίστοιχων Dirichlet-Neumann απεικονίσεων στην περίπτωση ασυνεχών συντελεστών καθώς και η ανάπτυξη λύσεων κλειστής μορφής ως προς τον χρόνο σε ευαίσθητα εξελικτικά προβλήματα αιχμής (π.χ. πρόβλημα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου) για την άμεση παραγωγή αποτελεσμάτων στον χρόνο χωρίς ενδιάμεσα χρονικά βήματα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στην κατεύθυνση αυτή, τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα που παρήχθησαν κατά τη διάρκεια του έργου αναφέρονται στην ανάπτυξη, σε κλειστή μορφή, της λύσης γραμμικών εξελικτικών προβλημάτων με χρονικές και χωρικές ασυνέχειες στις 1+1 διαστάσεις. Παράλληλα, έγιναν βήματα από συνεργαζόμενες ερευνητικές ομάδες για την επέκταση του νέου φορμαλισμού στις δύο χωρικές διαστάσεις, μέσω της μελέτης της γραμμικής εξίσωσης της θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις με πλάγιες Neumann συνοριακές συνθήκες. Πρόσφατα ξεκίνησε και η μελέτη μη-γραμμικών προβλημάτων με την παραγωγή αποτελεσμάτων αναφορικά με την γραμμική και μη γραμμική ΜΔΕ του Schrödinger στις 1+1 διαστάσεις με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev.

Πιο συγκεκριμένα, για την επέκταση και προσαρμογή του γνωστού φορμαλισμού της μεθόδου Φωκά από ομοιογενή ανοικτά χωρία σε ανομοιογενή κλειστά χωρία χώρου-χρόνου ακολουθήσαμε τα παρακάτω γενικά αλγοριθμικά βήματα:

- Διακριτοποίηση του ολικού χωρίου σε υποχωρία χρόνου-χώρου στα οποία η λύση του προβλήματος είναι αναλυτική συνάρτηση.
- Παραγωγή κατάλληλων αρχικών και συνοριακών συνθηκών, καθώς και συνθηκών διεπαφής για κάθε υποχωρίο και εφαρμογή κατάλληλων μετασχηματισμών με αλλαγή μεταβλητών για την απλοποίηση του προβλήματος.
- Παραγωγή της λύσης του προβλήματος σε κλειστή μορφή σε κάθε υποχωρίο η οποία εξαρτάται από άγνωστες συνοριακές ποσότητες διεπαφής.
- Χρήση των ολικών συνθηκών για την παραγωγή γραμμικού αλγεβρικού συστήματος και καθορισμό των άγνωστων συνοριακών ποσοτήτων στις διεπαφές.
- Εφαρμογή τεχνικών επανέναρξης με νέες αρχικές συνθήκες, για προβλήματα με ασυνέχειες στο χρόνο.
- Προσέγγιση της αναλυτικής λύσης με αριθμητικές μεθόδους σε υπερβολικές καμπύλες.

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 4 επιστημονικά άρθρα σε διεθνή περιοδικά και σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:

- D. Mantzavinos, M. Papadomanolaki, Y.G. Saridakis and A.G. Sifalakis, *Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1 + 1 dimensions*, J. Applied Numerical Mathematics (2014), in press, http:/dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2014.09.006
- M. Asvestas, A.G. Sifalakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012143
- M. Asvestas, E.P. Papadopoulou, A.G. Sifalakis and Y.G. Saridakis, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with Discontinuous Time Dependent Parameters*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015 Vol I, pp 1-6, WCE 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K.
- A.S. Fokas, A. Alexandrou-Himonas and D. Mantzavinos, *The Nonlinear Schrödinger equation on the half line*, Transactions of AMS, (accepted 2015)

Σημειώνουμε επίσης στα πλαίσια του έργου συγκαταλέγονται και τα επιστημονικά άρθρα:

- A.G. Sifalakis, M. Papadomanolaki, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *The Fokas method for heterogeneous reaction-diffusion brain toumors that incorporate Radiotherapy and Chemotherapy*, (submitted 2015)
- D. Mantzavinos and A.S. Fokas, *The Unified Transform For The Heat Equation: II. Non-Separable Boundary Conditions In Two Dimensions*, European J Applied Math, 2015 (http://dx.doi.org/10.1017/S0956792-515000224).

• Ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η μεταπτυχιακή διατριβή:

- Μ. Ασβεστάς, ”Εφαρμογή της μεθόδου Φωκά στο μαθηματικό μοντέλο διάχυσης των καρκινικών κυττάρων σε n+1 εγκεφαλικές περιοχές”, Μεταπτυχιακή Διατριβή 2013

Η ερευνητική δραστηριότητα της παρούσα δράσης πραγματοποιήθηκε από την ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Α. Σηφαλάκη, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη σε συνεργασία με τον μετακαλούμενο Έλληνα του εξωτερικού καθηγητή Α. Φωκά (Πανεπιστήμιο Cambridge) και τον ερευνητή Δ. Μαντζαβίνο

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

(Πανεπιστήμιο Notre Dame). Στα πλαίσια του έργου συνεργάστηκε και ολοκλήρωσε την ερευνητική διατριβή του ο μεταπτυχιακός φοιτητής Μ. Ασβεστάς.

Έχοντας ολοκληρώσει πλήρως την ανάπτυξη της μεθόδου για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 διαστάσεις, οι άμεσοι μελλοντικοί μας στόχοι περιλαμβάνουν την επέκταση της μελέτης της μεθόδου Φωκά σε εξελικτικά προβλήματα πολλαπλών χωρικών πεδίων στις δύο χωρικές διαστάσεις καθώς και σε ολοκληρώσιμα μη-γραμμικά προβλήματα.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.4, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Δ'.

3 Δράση 3: Υλοποίηση σε Σύγχρονα Υπολογιστικά Περιβάλλοντα

Σκοπός της παρούσας δράσης, όπως αναφέρεται στο ΤΔΥ, είναι η χρήση σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών αφενός μεν στην υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων και του αντίστοιχου επιστημονικού λογισμικού, που θα αναπτυχθούν στα πλαίσια της Δράσης 2 (ιδιαίτερα 2.2 και 2.3), αφετέρου δε στην ανάπτυξη της πλατφόρμας λογισμικού της Δράσης 4. Η υλοποίηση της πραγματοποιείται από δύο διαφορετικές δράσεις (3.1 και 3.2), ανάλογα με την κατηγορία αρχιτεκτονικών που χρησιμοποιούνται, των οποίων των οποίων η περιγραφή και η πρόοδος που επετεύχθη την τρέχουσα περίοδο ακολουθεί.

3.1 Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές

Αντικείμενο της συγκεκριμένης δράσης αποτελεί η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες παράλληλες αρχιτεκτονικές (Clusters, Grids ή/και Clouds). Σύμφωνα με το προγραμματισμό του έργου έμφαση δόθηκε στις Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ - Interface Relaxation) καθώς και στις υβριδικές μέθοδες Monte-Carlo.

Σύμφωνα και με το τεχνικό δελτίο του έργου, η υλοποίηση των μεθόδων αρχικά έλαβε χώρα σε Clusters και αφορά τόσο ομοιογενή, συμμετρικά σχήματα όπου γίνεται χρήση ενός συγκεκριμένου προγραμματιστικού μοντέλου ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI), όσο και ετερογενή, μη συμμετρικά σχήματα, όπου ο παραλληλισμός των μεθόδων επιτελείται σε πολλαπλά επίπεδα. Σύμφωνα με αυτά τα συνεργατικά σχήματα εφαρμόστηκε συνδυασμός μοντέλων ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI) με μοντέλα προγραμματισμού κοινής μνήμης (OpenMP,

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Pthreads) για την περισσότερο ευέλικτη αξιοποίηση των επεξεργαστών πολλαπλών πυρήνων που περιέχονται σε κάθε κόμβο του Cluster.

Σε επόμενο στάδιο, η εκτέλεση των προσομοιώσεων έλαβε χώρα σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (web services). Τα πλεονεκτήματα στη περίπτωση αυτή είναι σημαντικά αφού το λογισμικό είναι σε θέση να αξιοποιεί με καλύτερο τρόπο τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, ιδιαίτερα κατά την περίπτωση όπου υποβάλλονται μέσω του Cloud αιτήσεις για παράλληλη εκτέλεση από περισσότερους του ενός χρήστες. Στην κατεύθυνση αυτή υλοποιήθηκε το μοντέλο Λογισμικό ως Υπηρεσία (SaaS – Software as a Service), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδικτυακού γραφικού περιβάλλοντος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές.

Πιο συγκεκριμένα, κατά τη διάρκεια του έργου έλαβαν χώρα οι παρακάτω ερευνητικές δραστηριότητες:

- Ανασκόπηση της διεθνούς βιβλιογραφίας και μελέτη των μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλού πεδίου (Multi Domain) προκειμένου τα μέλη της ΚΕΟ3 να αποκτήσουν το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο κατανόησης των αριθμητικών μεθόδων επίλυσης του προβλήματος, οι οποίες θα υλοποιηθούν στα παραπάνω περιβάλλοντα. Επίσης, μελετήθηκαν μαθηματικές μέθοδοι της Δράσης 2.
- Ανασκόπηση λογισμικού ανοικτού (ελεύθερου) κώδικα (Open Source) αφενός για γλώσσες προγραμματισμού για παράλληλη υλοποίηση και αφετέρου για πλατφόρμες λογισμικού, που διαθέτουν υλοποιημένα εργαλεία για επίλυση PDEs και άλλες αριθμητικές μεθόδους.
- Εγκατάσταση Εικονικού Cluster σε OpenStack και υβριδική παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου MonteCarlo.
- Εγκατάσταση, δοκιμαστική λειτουργία και προετοιμασία (π.χ. σύνδεση με βιβλιοθήκες) της πλατφόρμας FEniCS για υλοποίηση των ΜΧΔ (μεθόδων IR).
- Παράλληλη υλοποίηση των ΜΧΔ GEO και ROB στη πλατφόρμα FeniCS (με RabbitMQ) σε περιβάλλον Cloud.
- Σύγχρονη / ασύγχρονη υλοποίηση της IR GEO στη FeniCS (με RabbitMQ) σε περιβάλλον Cloud.
- Αξιολόγηση των μεθόδων σε benchmark προβλήματα.
- Υλοποίηση ΜΧΔ σαν Υπηρεσία (IRaaS) σε περιβάλλον Cloud.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:
  - A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, P. Alefragis, S. Likothnassis, *Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO*, Proc. 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), pp 167-173, 2014
  - P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, *Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains*, Proc. 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), pp 1-6, 2014
  - Aigli Korfiati, Niki Sfika, Konstantis Daloukas, Christos Alexakos, Panagiota Tsompanopoulou and Spiros Likothanassis, *IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs, 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC'15)*, Proc World Congress on Engineering, Vol. I, 541-546, 2015 (Certificate of Merit)

  Σημειώνουμε επίσης ότι δεκτό προς δημοσίευση έχει γίνει και το επιστημονικό άρθρο:

  - A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis, *An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems*, Προψ. International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), 2015 (accepted).
- Ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η μεταπτυχιακή διατριβή:
  - Α. Κορφιάτη, "Σχεδιασμός και υλοποίηση προηγμένων μαθηματικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές", Μεταπτυχιακή Διατριβή 2014
- Ολοκληρώθηκε και είναι προσβάσιμος ο κώδικας των παράλληλων υλοποιήσεων των μεθόδων InterfaceRelaxation (GEO, ROB) και MonteCarlo.

Κατά τη διάρκεια του έργου η ΚΕΟ 3, ανέπτυξε τις παρακάτω συνεργασίες:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Με την ΚΕΟ 2, σε θέματα υλοποίησης της μεθόδου Interface Relaxation στην πλατφόρμα FEniCS (με την Αν. Καθηγήτρια Γ. Τσομπανοπούλου) και της μεθόδου Monte Carlo σε pThreads (με τον Καθηγητή Μ. Βάβαλη και τον υποψήφιο διδάκτορα Μ. Μαρούδα).
- Με την ΚΕΟ 1, σε θέματα παράλληλης υλοποίησης της μεθόδου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX, για την επίλυση του προβλήματος Περιβαλλοντικής Μηχανικής (πρόβλημα υφαλμύρινσης).

Τεχνική περιγραφή των δραστηριοτήτων της τρέχουσας περιόδου περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 3.1, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Ε'.

3.2 Υλοποίηση σε FPGAs και Πολυπύρηνα Συστήματα (Multicores, Manycores)

Ο σκοπός της Δράσης 3.2 είναι η αποδοτική υλοποίηση, ύστερα από μελέτη καταλληλότητας, αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε αρχιτεκτονικές επεξεργασίας γραφικών (Graphics Processor Units, GPU) καθώς και σε επαναδιατασσόμενες (reconfigurable) αρχιτεκτονικές (πχ. Field Programmable Gate Arrays, FPGAs).

Κατά τη διάρκεια του τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα περιλαμβάνουν:

- Παρουσίαση ενός καινοτόμου πλαισίου το οποίο αυτοματοποιεί την διαχείριση δεδομένων (data management) από ένα σύστημα χρόνου εκτέλεσης (runtime system, RTS) σε ένα ετερογενές επεξεργαστικό σύστημα. Το πλαίσιο αυτό χρησιμοποιεί compile-time ανάλυση βασισμένη στο πολυεδρικό μοντέλο (polyhedral model) με σκοπό να συνδέσει υπολογισμούς με τα δεδομένα που αυτοί οι υπολογισμοί παράγουν και καταναλώνουν.
- Υλοποίηση εκτέλεσης προγράμματος επίλυσης ΜΔΕ με την χρήση τεχνικών Monte Carlo σε ετερογενές επεξεργαστικό σύστημα CPU/GPU με χρήση πολυεδρικού μοντέλου.
- Χρησιμοποιήθηκε το εργαλείο SOpenCL για την υλοποίηση επιταχυντών υλικού επαναδιατασσόμενης λογικής για εφαρμογές που ανήκουν στα Dwarfs (σύνολα εφαρμογών που κάθε ένα από αυτά τα σύνολα μπορούν να χαρακτηρισθούν από ένα κοινό πρότυπο (pattern) υπολογισμών και επικοινωνίας) όπως είναι το Dense Linear Algebra το οποίο περιλαμβάνει αλγορίθμους (π.χ. LU Decomposition) που επεξεργάζονται πυκνούς πίνακες (dense arrays). Για την ανάπτυξη επιταχυντών υλικού επαναδιατασσόμενης λογικής γίνεται χρήση ενός συνόλου μετροπρογράμματων, των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

OpenDwarfs, που είναι open-source υλοποιήσεις σε OpenCL των Dwarfs. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι οι FPGAs είναι ανταγωνιστικές με τις GPUs όσον αφορά την ταχύτητα εκτέλεσης τέτοιων αλγορίθμων.

- Δημιουργήθηκε μια grammar-based μεθοδολογία διαχείρισης δεδομένων για FPGA επιταχυντές υλικού επαναδιατασσόμενης λογικής.
- Υλοποίηση εκτέλεσης προγράμματος επίλυσης ΜΔΕ με την χρήση τεχνικών Monte Carlo σε FPGAs.

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων και επιστημονικών περιοδικών:
  - K. Krommydas, W. Feng, M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *On the Characterization of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Platforms*, 25th IEEE Systems, Archit. and Processors, IEEE Xplore Proc ASAP, pp 153-160, 2014 (Best Paper Candidate)
  - M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *A grammar induction method for clustering of operations in complex FPGA's designs*, IEEE 22nd Int. Symp. F.-Prog. Cust. Mac., IEEE Xplore Proc FCCM, pp 194-201, 2014
  - K. Krommydas, W. Feng, CD Antonopoulos, N. Bellas, *OpenDwarfs: Characterization of Dwarf-Based Benchmarks on Fixed and Reconfigurable Architectures*, J Sign Process Syst, 2015 (accepted)

  Σημειώνουμε επίσης ότι δεκτό προς δημοσίευση έχει γίνει και το επιστημονικό άρθρο:

  - P. Skribonis, G. Zindros, I. Parnassos, M. Owaida, N. Bellas, P. Ienne, *Exploring Automatically Generated Platforms in High Performance FPGAs*, ParaFPGA 2015, Proceedings Advances in Parallel Computing (accepted).
- Ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η μεταπτυχιακή διατριβή:
  - Β. Βασιλειάδης, "Optimizing memory management on heterogeneous systems using polyhedral, compile-time techniques", Μεταπτυχιακή Διατριβή 2013

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Ολοκληρώθηκε και είναι προσβάσιμο το λογισμικό του σχεδιασμού των επιταχυντών υλικού (hardware accelerators) σε γλώσσα Verilog καθώς και το λογισμικό OpenCL για υλοποίηση σε GPU.

Στα πλαίσια της παρούσας δράσης τα μέλη της ΚΕΟ 2 του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ανέπτυξαν συνεργασία με ερευνητικές ομάδες του πολυτεχνείου École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) της Ελβετίας και του πανεπιστημίου Virginia Tech των ΗΠΑ.

Τεχνική περιγραφή των δραστηριοτήτων της τρέχουσας περιόδου περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 3.2, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα ΣΤ'.

4 Δράση 4: Συγκερασμός και Επικύρωση

Ανάπτυξη πλατφόρμας λογισμικού για προβλήματα πολλαπλών πεδίων καθώς και επικύρωση της για την επίλυση προβλημάτων της Περιβαλλοντικής Μηχανικής και της Ιατρικής

4.1 Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί η σχεδίαση μιας αρχιτεκτονικής η οποία θέτει τις βάσεις για μια ενοποιημένη προσέγγιση αντιμετώπισης των σύνθετων προβλημάτων που μας απασχολούν καλύπτοντας τόσο την αναγκαιότητα σχεδίασης/ανάπτυξης λογισμικού με δυνατότητα ενσωμάτωσης σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων όσο και ανάπτυξης ενός λειτουργικού περιβάλλοντος επίλυσης σύνθετων προβλημάτων, το οποίο θα ενσωματώνει μεθόδους και λογισμικό της Δράσης 2, θα επιτρέπει την εκμετάλλευση των σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και θα διευκολύνει την αποδοτική χρήση των λογισμικών μονάδων. Παράλληλο στόχο αποτελεί επίσης και η προσαρμογή της αρχιτεκτονικής αυτής σε ήδη υπάρχουσα πλατφόρμα ανοικτού λογισμικού (Fenics) ώστε το περιβάλλον αυτό να αποτελέσει και την πλατφόρμα αξιολόγησης των μεθόδων επίλυσης σύνθετων ΜΔΕ και δυνητικά την επικύρωσή τους σε σημαντικά προβλήματα της Περιβαλλοντικής Μηχανικής και της Ιατρικής. Πιο συγκεκριμένα, οι σημαντικότεροι στόχοι της δράσης είναι οι ακόλουθοι:

- Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ).
- Επέκταση του ΠΕΠ για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Επέκταση του ΠΕΠ για την αξιοποίηση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ετερογενών συστημάτων, υποδομής cloud, αλλά και σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage).

Κατά τη διάρκεια του έργου τα σημαντικότερα παραγόμενα ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Θέσπιση κριτηρίων επιλογής, έρευνα, αξιολόγηση και επιλογή του πακέτου FEniCS ως βασικού ΠΕΠ.
- Επέκταση του ΠΕΠ με βελτιωμένο περιβάλλον μετα-υπολογισμού για προβλήματα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλής φυσικής. Υλοποίηση μεθόδων Schwarz, Interface Relaxation GEO/ROB και Monte-Carlo.
- Επέκταση του ΠΕΠ για την αξιοποίηση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ετερογενών συστημάτων, υποδομής Cloud αλλά και σύγχρονων μέσων αποθήκευσης (flash storage) για την επίλυση μεγάλων αραιών γραμμικών συστημάτων.

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το τεχνικό δελτίο του έργου, είναι τα ακόλουθα:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Πρότυπο λογισμικό για Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων το οποίο περιλαμβάνει τα ακόλουθα επιμέρους στοιχεία:
  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη προβλημάτων MDMP (μέθοδοι Schwarz, υβριδική αιτιοκρατική/στοχαστική, GEO, ROB).
  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη εναλλακτικών αρχιτεκτονικών (επέκταση Whale).
  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση cloud με χρήση web services.
  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση προσαρμοσμένων (custom) μηχανισμών cloud.
  - Η προσαρμοσμένη (custom) πλατφόρμα cloud IRaaS.
- Πλέον των παραδοτέων που προέβλεπε το τεχνικό δελτίο, στα πλαίσια της δράσης παρήχθησαν και οι ακόλουθες πέντε δημοσιεύσεις:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Athanasios Fevgas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, *Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage*, Proceedings of the 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), pp. 97-102, 2014.
- Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, *Efficient Solution of Large Sparse Linear Systems in Modern Hardware*, Proceedings of the 6th International Conference on Information, Intelligence, Systems and Applications (IISA2015), 2015 (accepted)
- Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas and Panagiota Tsompanopoulou, *Dynamic Cloud Resources Allocation on Multidomain/Multiphysics Problems*, Proceedings of the 3rd International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud 2015), pp 31-37, 2015.
- Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, *On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems*, Journal of Mathematics and Statistical Science, 2015 (in press).
- V. Vasileiadis, CD Antonopoulos, G. Zindros, *Automating data management in heterogeneous systems using polyhedral analysis*, PCI 2015, ICPS ACM Proc, pp 317-322, 2015

Επισημαίνουμε επίσης ότι σειρά εργασιών που πραγματεύονται και με το αντικείμενο της παρούσας δράσης έχουν κατατεθεί ως παραδοτέα άλλων δράσεων.

Η Δράση 4.1, ως κεντρική στο έργο MATENVMED καθώς καλείται να ενοποιήσει και να συγκεράσει τις ερευνητικές προσπάθειες που αναπτύσσονται στις υπόλοιπες δράσεις του έργου, ενθάρρυνε τη συνεργασία μεταξύ και των 3 ερευνητικών ομάδων. Πιο συγκεκριμένα, στον Πίνακα 1 συνοψίζονται οι βασικές δραστηριότητες που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της δράσης και αναφέρονται οι ομάδες που συμμετείχαν.

Βασική επιδίωξη στο άμεσο μέλλον είναι η προτυποποίηση της υποδομής που αναπτύχθηκε και η προσφορά της στην κοινότητα του FEniCS ώστε να είναι ευρέως διαθέσιμη και να αυξηθεί η βάση χρηστών της. Επιπλέον, ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η υλοποίηση επιπλέον υπηρεσιών για την υποστήριξη εφαρμογών MDMP και η βελτιστοποίηση επίδοσης. Τέλος, στόχος είναι η αξιοποίηση της πλατφόρμας που αναπτύχθηκε και για άλλες πραγματικές, κρίσιμες εφαρμογές παρόμοιες με αυτές που αποτέλεσαν αντικείμενο του έργου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Προδιαγραφές ΠΕΠ	x	x	x
Απαιτήσεις για υποστήριξη προβλημάτων MDMP	x	x	x
Υλοποίηση Μεθόδου GEO		x	x
Υλοποίηση Μεθόδου ROB		x	x
Υλοποίηση Μεθόδου Schwarz	x	x	
Υλοποίηση Μεθόδου Hybrid		x	x
Υποδομή Υποστήριξης GPUs/FPGAs/Flash Storage		x	
Υποδομή Υποστήριξης Cloud (Web Services)		x	
Υποδομή Υποστήριξης Cloud (IRaaS)			x
Εφαρμογή σε Προβλήματα Υφαλμύρισης	x	x	x

Πίνακας 1: Συνεργασίες στα πλαίσια της Δράσης 4.1.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.1, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Ζ'.

4.2 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής

Το πρόβλημα της εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων είναι ένα εξαιρετικής κρισιμότητας πρόβλημα του οποίου η ιατρική αντιμετώπιση παρουσιάζει μεγάλες δυσκολίες. Τα μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν το πρόβλημα αυτό ανήκουν στην κατηγορία των ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές, λόγω ανομοιογένειας του εγκεφαλικού ιστού, και συνεπώς ανήκουν στην κατηγορία των σύνθετων ΜΔΕ που μελετώνται στο παρόν έργο. Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων) με ένα τόσο σημαντικό πρόβλημα, αφετέρου δε η μελέτη της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, με χρήση νέων μεθόδων, λογισμικού και σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών.

Κατά τη διάρκεια του έργου τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα της δράσης αναφέρονται:

- Στον συνδυασμό αριθμητικών σχημάτων χρονικής διακριτοποίησης Runge-Kutta και της ασυνεχούς μεθόδου dDHC για την επίλυση σε σειριακά και ετερογενή (CPU/GPU) παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα:
  - Γραμμικών και μη-γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

εγκεφάλου στις 1+1 και 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes) τα οποία δύνανται να ενσωματώνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας.

- Μη-γραμμικών μοντέλων βιολογικής εισβολής πληθυσμών που περιγράφονται από τις γενικευμένες ΜΔΕ του Fisher και των Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov.

- Στην επικύρωση της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά (βλ. Τελική Τεχνική Έκθεση 2015 Δράσης 2.4) μέσω της μελέτης γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+1 διαστάσεις τα οποία δύνανται να ενσωματώνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας.

- Στην μελέτη γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε πραγματικά εγκεφαλικά πεδία που περιγράφονται από Magnetic Resonance Imaging (MRI) εγκεφάλου μέσω της πλατφόρμας λογισμικού FEniCS.

Στο ανωτέρω πλαίσιο αξίζει να σημειώσουμε ότι:

- Για την επικύρωση της νέας ασυνεχούς dDHC μεθόδου σε γενικευμένα γραμμικά μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης επιθετικών καρκινικών όγκων εγκεφάλου, καθώς και μοντέλα βιολογικής εισβολής πληθυσμών, και με στόχο την αύξηση της αποδοτικότητας (τάξη σύγκλισης, υπολογιστικό κόστος, κλπ) της μεθόδου χρησιμοποιήθηκαν:

  - Σχήματα Diagonally Implicit Runge-Kutta (DIRK) και Implicit Explicit RK (IMEX RK), αντίστοιχα, σε γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών κυττάρων σε ανομοιογενή εγκεφαλικό ιστό,
  - Σχήματα Strong Stability Preserving RK (SSPRK) σε γενικευμένα Fisher και KPP μη-γραμμικά προβλήματα βιολογικής εισβολής/μετακίνησης πληθυσμών σε ομοιογενή περιβάλλοντα.

- Για την αποτελεσματική εφαρμογή πρωτοκόλλων θεραπείας στα μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου εισήχθησαν στρατηγικές επανέναρξης της αριθμητικής (μέθοδος dDHC) ή αναλυτικής (μέθοδος Φωκά) διαδικασίας στα χρονικά σημεία αλλαγής πρωτοκόλλων.

- Για την μελέτη προβλημάτων πραγματικής γεωμετρίας, που περιγράφεται από MRI εγκεφάλου, αναπτύχθηκαν τεχνικές αναγνώρισης ψηφιοποίησης και διακριτοποίησης περιοχών εγκεφαλικού ιστού με διαφορετικό συντελεστή διάχυσης, οι οποίες στη συνέχεια εισήχθησαν στην πλατφόρμα FeniCS και μέσω της οποίας παρήχθησαν τα πρώτα αποτελέσματα αναφορικά με γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το τεχνικό δελτίο του έργου, είναι τα ακόλουθα:

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Τρία (3) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές (εκ των οποίων ένα έχει λάβει βραβείο καλύτερης δημοσίευσης):
  - IE Athanasakis , EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012133.
  - AG Sifalakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *The Unified Transform for a Reaction-Diffusion Brain Tumor Model that Incorporates Tissue Heterogeneity and Radiotherapy*, Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 137-142, 2015
  - IE Athanasakis, ND Vilanakis and EN Mathioudakis, *Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

  Άλλες εργασίες που αφορούν σε προβλήματα εξέλιξης καρκινικών όγκων έχουν παραδοθεί ως παραδοτέα άλλων δράσεων.
- Λογισμικό επαλήθευσης και εφαρμογής των μεθόδων.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.2, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Η'.

4.3 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής

Το πρόβλημα της υφαλμύρισης (διείσδυση θαλασσινού ύδατος) υπόγειων υδροφορέων γλυκών υδάτων έχει αναδειχθεί σε ένα σημαντικής σπουδαιότητας οικολογικό πρόβλημα που απασχολεί τη χώρα, ιδιαίτερα δε τη νησιωτική. Τα μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν το πρόβλημα αυτό ανήκουν επίσης στην κατηγορία των ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές, λόγω ανομοιογένειας της υδραυλικής αγωγιμότητας του εδάφους, και συνεπώς ανήκουν στην κατηγορία των σύνθετων ΜΔΕ που μελετώνται στο παρόν έργο. Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων και λογισμικού) με ένα σημαντικό περιβαλλοντικό πρόβλημα, αφετέρου δε την ανάπτυξη λογισμικού για τη μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα με υψηλής ακρίβειας μεθόδους αλλά και αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

Στα πλαίσια αυτά, κύριοι άξονες των ερευνητικών αποτελεσμάτων κατά τη διάρκεια του έργου απετέλεσαν οι:

- Ανάπτυξη/προσαρμογή και μελέτη συμπεριφοράς του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης Algorithm of Pattern Extraction (ALOPEX) για βέλτιστη διαχείριση της άντλησης από παράκτιους υδροφορείς,
- Συνδυασμός του αλγορίθμου ALOPEX αφενός μεν με τις πλατφόρμες λογισμικού PTC και FEniCS, αφετέρου δε με την μέθοδο collocation HC (Δράση 2.1), με στόχο την ολοκληρωμένη αριθμητική διαχείριση του προβλήματος διείσδυσης υφάλμυρου νερού σε παράκτιους υδροφορείς και ιδιαίτερα των υδροφορέων της Χερσονήσου Ηρακλείου Κρήτης και του Βαθέως Καλύμνου.

Στο ανωτέρω πλαίσιο αξίζει να σημειώσουμε ότι:

- Για την ανάπτυξη και μελέτη της νέα μορφής του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX καθώς και ενός πλήρους συστήματος κυρώσεων για την επιβολή των περιοριστικών συνθηκών του προβλήματος χρησιμοποιήθηκαν:
  - Το προσεγγιστικό μοντέλο του Strack το οποίο βασίζεται στις παραδοχές αφενός μεν ύπαρξης απότομης σφήνας (sharp interface) και συνεπώς ανυπαρξία ζώνης υφάλμυρου νερού (transition zone) μεταξύ του γλυκού και αλμυρού ύδατος, και αφετέρου της εξίσωσης Ghyben-Herzberg η οποία σε συνθήκες σταθερής κατάστασης (steady state) προσεγγίζει τη θέση της υφάλμυρης σφήνας.
  - Νέα αντικειμενική συνάρτηση κόστους, ικανής να συνδυάζεται με διαδικασίες feedback.
  - Νέες μεταβλητές παράμετροι θορύβου (noise) και ανάδρασης (feedback) του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX καθώς και τιμές τους για την επιτάχυνση της σύγκλισης.
  - Νέο σύστημα *κυρώσεων (penalty)* για τον έλεγχο εξέλιξης της διαδικασίας βελτιστοποίησης ALOPEX.
  - Νέα κριτήρια τερματισμού της διαδικασίας βελτιστοποίησης.
- Για την επικύρωση μεθόδων και λογισμικού μελετήθηκε:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

  - Ο υπόγειος παράκτιος υδροφορέας της Χερσονήσου Κρήτης στις δύο και τρεις διαστάσεις μέσω της συνδυαστικής εφαρμογής του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX και των πακέτων λογισμικού FEniCS και PTC, αντίστοιχα.
  - Δισδιάστατες ορθογώνιες προσεγγίσεις του υπόγειου παράκτιου υδροφορέα στο Βαθύ Καλύμνου μέσω της συνδυαστικής εφαρμογής του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX και της πλατφόρμας FEniCS, της μεθόδου Hermite Collocation αλλά και αναλυτικών προσεγγίσεων.

- Αναπτύσσεται μεθοδολογία για την εκ των προτέρων εγγύηση ευστάθειας των υπολογισμών.

Τα παραδοτέα της δράσης, σύμφωνα και με το τεχνικό δελτίο του έργου, περιγράφονται ως εξής:

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Τρία (3) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές:
  - PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete*, Proc. of INASE-WHH 2015 Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, pp 329-334, 2015.
  - IE Athanasakis, ZA Dokou, EN Mathioudakis, PN Stratis and ND Vilanakis, *Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer*, J Math. Mod. Methods in Applied Sciences, 9, pp. 727-732, 2015
  - PN Stratis, YG Saridakis, MS Zakynthinaki and EP Papadopoulou, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers*, 2nd Intern. Conf. on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012112

  Επίσης έχουν υποβληθεί δύο (2) άρθρα για δημοσίευση σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά:

  - PN Stratis, GP Karatzas, EP Papadopoulou, MS Zakynthinaki and YG.Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers*, PLOSone (Revised version Submitted 2015)

– PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou, and YG.Saridakis, *PTC Simulations, Stochastic Optimization and Safety Strategies for Groundwater Pumping Management: Case Study of the Hersonissos Coastal Aquifer in Crete*, Applied Water Science (submitted 2015)

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.3, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Θ'.

5 Δράση 5: Αξιολόγηση

Έπειτα από:

- Μελέτη του Τεχνικού Δελτίου Έργου, των Τεχνικών Εκθέσεων και όλων των Επιστημονικών Άρθρων,
- Παρακολούθηση όλων των παρουσιάσεων της Ημερίδας Παρουσίασης των Αποτελεσμάτων
- Συνεντεύξεις από όλα τα μέλη των ΚΕΟ του έργου

ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η Τελική Έκθεση Αξιολόγησης από τους καθηγητές Μ. Βραχάτη και Δ. Νούτσο των Πανεπιστημίων Πατρών και Ιωαννίνων. Η έκθεση, η οποία επισημαίνει την επιτυχή ολοκλήρωση του προγράμματος, επισυνάπτεται στο Παράρτημα Ι'.

6 Δράση 6: Διάχυση Αποτελεσμάτων

Οι βασικές δραστηριότητες επίτευξης της διάχυσης των ερευνητικών αποτελεσμάτων του έργου περιλαμβάνονται στις εξής γενικές κατηγορίες:

- Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια.
- Διοργάνωση επιστημονικών ημερίδων.
- Ανάπτυξη ιστοσελίδας του έργου.
- Διοργάνωση ημερίδας παρουσίασης των αποτελεσμάτων του έργου.

6.1 Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια

Στο πλαίσιο διάχυσης των αποτελεσμάτων, κατά τη διάρκεια του έργου, δώσαμε **43** επιστημονικές διαλέξεις σε **20** διεθνή επιστημονικά συνέδρια και δημοσιεύσαμε **24** επιστημονικές εργασίες σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων (ύστερα από κρίση) καθώς και **10** επιστημονικές εργασίες σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά, υπερκαλύπτοντας τον στόχο των 18 δημοσιεύσεων. Από τις παρουσιάσεις σε διεθνή συνέδρια: **3** βραβεύτηκαν με το Βραβείο Καλλίτερης Εργασίας (Best Paper Award), **1** έλαβε Certificate of Merit, ενώ **1** ήταν υποψήφια για το Βραβείο Καλλίτερης Εργασίας.

Τα ανωτέρω στοιχεία παρουσιάζονται και στον πίνακα που ακολουθεί.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ				
ΤΙΤΛΟΣ	ΤΟΠΟΘΕΣΙΑ	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ	ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ	ΒΡΑΒΕΙΑ
NUMAN 2012	Ιωάννινα Sept 2012	3	-	-
PDE Software Frameworks	Münster Jun 2012	1 (Poster)	-	-
ICAEM 2013	London Jul 2013	1	1	-
ICPDC 2013	London Jul 2013	1	1	1
IC-MSQUARE 2013	Prague Sept 2013	4	4	-
MCQMC2014	Leuven April 2014	1	1	-
IEEE FCCM 2014	Boston May 2014	1	1	-
IEEE ASAP 2014	Zurich Jun 2014	1	1	1
NumAn 2014	Chania Sept 2014	12	3	1
CMA 2014	Kuwait Nov 2014	3	-	-
ICAEM 2015	London Jul 2015	2	2	1
ICPDC 2015	London Jul 2015	2	2	2
PMAMCM 2015	Zakynthos Jul 2015	2	2	-
WHH 2015	Zakynthos Jul 2015	1	1	-
IISA 2015	Cofru Jul 2015	1	1	-
FICloud 2015	Rome Aug 2015	1	1	-
ParCo 2015	Edinburgh Sept 2015	1	1	-
ICNAAM 2015	Rodos Sept 2015	1	1	-
PCI 2015	Athens Oct 2015	1	1	-
MMCTSE 2015	Bratislava Nov 2015	3	3	-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

6.2 Διοργάνωση Επιστημονικών Ημερίδων

Στα πλαίσια του διεθνούς επιστημονικού συνεδρίου 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014) διοργανώθηκαν δύο επιστημονικές ημερίδες (workshops) με σκοπό την διάχυση των αποτελεσμάτων του έργου σε ένα ευρύ διεθνές επιστημονικό ακροατήριο. Τα επιστημονικά αντικείμενα των ημερίδων αναφέρονται στις περιοχές

- Multi-Physics, Multi-Domain problems
- Fokas Method

με αντίστοιχους τίτλους

- Numerical methods and software platform for solving multi-physics, multi-domain problems on modern computer architectures (3 Σεπτεμβρίου 2014, 10 ομιλίες)
- Analytical and Numerical Aspects of Fokas Transform Method (2 Σεπτεμβρίου 2014, 10 ομιλίες)

Στις ημερίδες αυτές συμμετείχαν όλα τα μέλη των ΚΕΟ και ΟΕΣ του έργου με 12 διαλέξεις και 1 πόστερ. Τρεις εργασίες δημοσιεύτηκαν στα πρακτικά του συνεδρίου ύστερα από κρίση. Το βραβείο "T.S. Papatheodorou Young Researcher Award" απενεμήθη στον Υπ.Διδ. Ν. Βιλανάκη, μέλος της ΟΕΣ του Πολυτεχνείου Κρήτης για την παρουσίαση της ερευνητικής εργασίας "Solving Discontinuous Collocation equations for a class of brain tumor models on GPUs".

6.3 Ανάπτυξη Ιστοσελίδας

Την Α' εξάμηνο της τρέχουσας περιόδου, με συνεργασία όλων των ερευνητικών ομάδων του έργου, ολοκληρώθηκαν οι προδιαγραφές της τελικής μορφής της ιστοσελίδας του έργου και ξεκίνησε η κατασκευή της ύστερα από σχετική προκήρυξη. Το Β' εξάμηνο οι εργασίες ολοκληρώθηκαν και η ιστοσελίδα στην τελική της μορφή λειτούργησε στην διεύθυνση http://www.tuc.gr/index.php?id=5209. Έκτοτε δε, ενημερώνεται συνεχώς με νέο περιεχόμενο.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Αναλυτικότερη περιγραφή των ανωτέρω στοιχείων περιλαμβάνονται στην Τελική Τεχνική Έκθεση της Δράσης 6, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα ΙΑ'.

7 Δημοσιεύσεις

Δράση 2.1 Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation (Στόχος: 3)

1. IE Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013, Vol I, pp 241-246, WCE-ICAEM 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.

2. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and IMEX Runge-Kutta for a Treated Quasi-linear Heterogeneous Brain Tumor Model, Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 183-188, 2015

3. EN Mathioudakis, ND Vilanakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Parallel Iterative Solution of the Hermite Collocation Equations on GPUs, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol II, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K. (Best Paper Award)

4. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015, Vol I, pp. 137-142, WCE-ICAEM 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

5. N. Vilanakis and E. Mathioudakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs II, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012097

Δράση 2.2 Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ (Στόχος: 3)

6. M. Vavalis, M. Mu, G. Sarailidis, Finite element simulations of window Josephson junctions, J Comp Applied Math, 236, pp3186-3197, 2012

7. P. Tsompanopoulou, Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, Proceedings of 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), pp 260-265, 2014.

8. A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis, An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems, International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), Rhodes, Greece, Sept. 23-29, 2015 (accepted).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Δράση 2.3 Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι (Στόχος: 3/1)

9. Manolis Vavalis, Real Valued Block SOR Iterative Methods for the Helmholtz Equation, Intern. J Num. Methods & Appl., 10(3), 99-126, 2013

10. Manolis Vavalis and Giorgos Sarailidis, On the Stochastic/Deterministic Numerical Solution of Composite Deterministic Elliptic PDE Problems, Inter. J of Math.l Models and Methods in Applied Science, 9, 740-747, 2015

11. E. Maroudas, N. Vilanakis, Ch. Antonopoulos, E. Mathioudakis, Y. Saridakis and M. Vavalis, Schwarz Splitting For The Steady State Problem Of Saltwater Intrusion In Coastal Aquifers, Inter. J of Math.l Models and Methods in Applied Science, 9, 733-739, 2015

12. Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, and Panayiotis Bozanis, A Study of Sparse Matrix Methods on New Hardware: Advances and Challenges, International Journal of Monitoring and Surveillance Technologies Research (IJMSTR), in press

Δράση 2.4 Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά (Στόχος: 2)

13. D. Mantzavinos, M. Papadomanolaki, Y.G. Saridakis and A.G. Sifalakis, *Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1 + 1 dimensions*, J. Applied Numerical Mathematics (2014), in press, http:/dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2014.09.006

14. M. Asvestas, A.G. Sifalakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012143

15. M. Asvestas, E.P. Papadopoulou, A.G. Sifalakis and Y.G. Saridakis, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with Discontinuous Time Dependent Parameters*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015 Vol I, pp 1-6, WCE 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K.

16. A.S. Fokas, A. Alexandrou-Himonas and D. Mantzavinos, *The Nonlinear Schrödinger equation on the half line*, Transactions of AMS, (accepted 2015)

Δράση 3.1 Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές (Στόχος: 3)

17. A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, P. Alefragis, S. Likothnassis, *Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO*, Proc. 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), pp 167-173, 2014

18. P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, *Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains*, Proc. 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), pp 1-6, 2014

19. Aigli Korfiati, Niki Sfika, Konstantis Daloukas, Christos Alexakos, Panagiota Tsompanopoulou and Spiros Likothanassis, *IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs, 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC'15)*, Proc World Congress on Engineering, Vol. I, 541-546, 2015 (Certificate of Merit)

Δράση 3.2 Υλοποίηση σε FPGAs και Πολυπύρηνα Συστήματα (Στόχος: 2)

20. K. Krommydas, W. Feng, M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *On the Characterization of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Platforms*, 25th IEEE Systems, Archit. and Processors, IEEE Xplore Proc ASAP, pp 153-160, 2014 (Best Paper Candidate)

21. M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *A grammar induction method for clustering of operations in complex FPGA's designs*, IEEE 22nd Int. Symp. F.-Prog. Cust. Mac., IEEE Xplore Proc FCCM, pp 194-201, 2014

22. K. Krommydas, W. Feng, CD Antonopoulos, N. Bellas, *OpenDwarfs: Characterization of Dwarf-Based Benchmarks on Fixed and Reconfigurable Architectures*, J Sign Process Syst, 2015 (accepted)

- P. Skribonis, G. Zindros, I. Parnassos, M. Owaida, N. Bellas, P. Ienne, *Exploring Automatically Generated Platforms in High Performance FPGAs*, ParaFPGA 2015, Proceedings Advances in Parallel Computing (accepted).

Δράση 4.1 Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού (Στόχος: 0)

23. Athanasios Fevgas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, *Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage*, Proceedings of the 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), pp. 97-102, 2014.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

24. Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, *Efficient Solution of Large Sparse Linear Systems in Modern Hardware*, Proceedings of the 6th International Conference on Information, Intelligence, Systems and Applications (IISA2015), 2015 (accepted)

25. Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas and Panagiota Tsompanopoulou, *Dynamic Cloud Resources Allocation on Multidomain/Multiphysics Problems*, Proceedings of the 3rd International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud 2015), pp 31-37, 2015.

26. Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, *On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems*, Journal of Mathematics and Statistical Science, 2015 (in press).

27. V. Vasileiadis, CD Antonopoulos, G. Zindros, *Automating data management in heterogeneous systems using polyhedral analysis*, PCI 2015, ICPS ACM Proc, pp 317-322, 2015

Δράση 4.2 Επικύρωση σε Προβλήματα Ιατρικής (Στόχος: 2)

28. IE Athanasakis , EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012133.

29. AG Sifalakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *The Unified Transform for a Reaction-Diffusion Brain Tumor Model that Incorporates Tissue Heterogeneity and Radiotherapy*, Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 137-142, 2015

30. IE Athanasakis, ND Vilanakis and EN Mathioudakis, *Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

Δράση 4.3 Επικύρωση σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής (Στόχος: 2)

31. PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management*

of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete, Proc. of INASE-WHH 2015 Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, pp 329-334, 2015.

32. IE Athanasakis, ZA Dokou, EN Mathioudakis, PN Stratis and ND Vilanakis, *Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer*, J Math. Mod. Methods in Applied Sciences, 9, pp. 727-732, 2015

33. PN Stratis, YG Saridakis, MS Zakynthinaki and EP Papadopoulou, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers*, 2nd Intern. Conf. on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012112

- PN Stratis, GP Karatzas, EP Papadopoulou, MS Zakynthinaki and YG.Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers*, PLOSone (Revised version Submitted 2015)

- PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou, and YG.Saridakis, *PTC Simulations, Stochastic Optimization and Safety Strategies for Groundwater Pumping Management: Case Study of the Hersonissos Coastal Aquifer in Crete*, Applied Water Science (submitted 2015)

Παράρτημα Α΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 2.1

Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

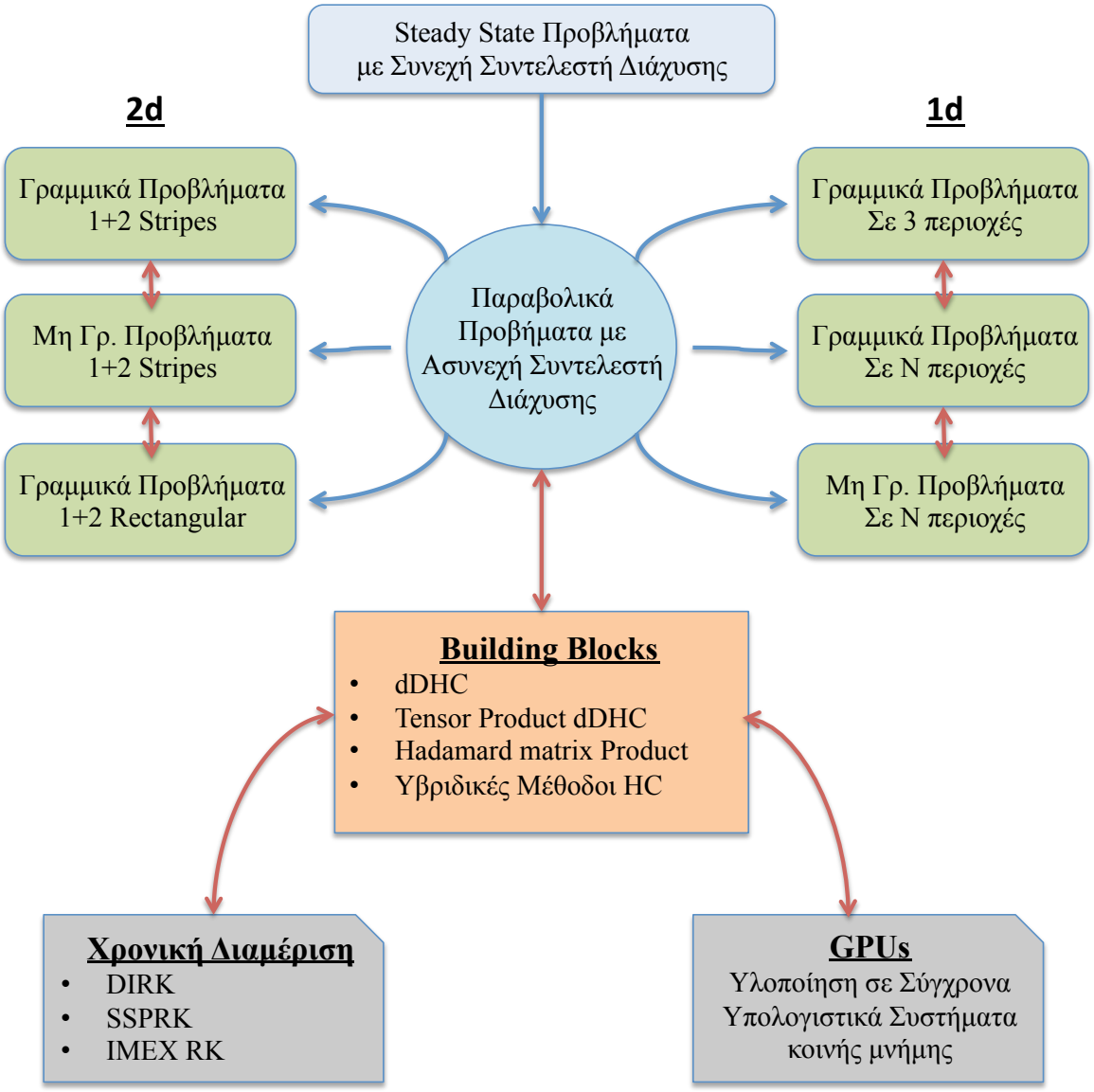
1 Σκοπός **4**
1.1 Τα βασικά μαθηματικά εργαλεία (Building Blocks) της Δράσης 2.1 4
1.2 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις 5
1.3 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, στις 1+2 διαστάσεις 6
1.4 Το γενικό ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις: Η dDHC και η προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα κυβικά πολυώνυμα 6
1.5 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις 6
1.6 IMEX Runge-Kutta και dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης CPU/GPU 7

2 Μεθοδολογία **7**
2.1 Τα βασικά μαθηματικά εργαλεία (Building Blocks) της Δράσης 2.1 7
2.1.1 Γενικευμένα Πολυώνυμα Hermite 8
2.1.2 Η μέθοδος derivative Discontinuous Hermite Collocation (dDHC) 14
2.1.3 Η dDHC μέθοδος στις 2 χωρικές διαστάσεις: Χρήση Kronecker Γινομένων 17
2.1.4 Η dDHC μέθοδος για μη-γραμμικά προβλήματα: Χρήση Γινομένων Hadamard 18
2.1.5 Προσέγγιση του ασυνεχούς Συντελεστή Διάχυσης με συνεχείς συναρτήσεις στις μία και δύο διαστάσεις 19
2.2 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις 21
2.3 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, στις 1+2 διαστάσεις 25
2.4 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με γωνιακές ασυνέχειες 27
2.5 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις 29
2.6 IMEX Runge-Kutta και dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης CPU/GPU 30

3 Αποτελέσματα **34**

4 Παραδοτέα - Συνεργασίες **39**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 1: Βασικές Ερευνητικές Δραστηριότητες Δράσης 2.1

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που αναπτύχθηκε, στα πλαίσια της παρούσας δράσης, στόχευσε κυρίως στην ανάπτυξη ορθογώνιων collocation μεθόδων για την επίλυση μη-κλασικών ΜΔΕ (multiphysics, multidomain - MPMD) και την αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές, αλλά και στην κατανόηση της επίδρασης των ασυνεχειών αυτών στην συμπεριφορά της μεθόδου collocation όσον αφορά τον βαθμό σύγκλισης και την ευστάθεια της μεθόδου, καθώς και της κατάστασης των αντίστοιχων γραμμικών συστημάτων.

Κεντρική ενέργεια της δράσης απετέλεσε η εισαγωγή μίας νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου (dDHC). Η νέα dDHC μέθοδος, σε συνδυασμό με υψηλής τάξης κατάλληλα χρονικά σχήματα Runge-Kutta, εφαρμόστηκε σε γραμμικά και μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις και μελετήθηκε η τάξη σύγκλισής της. Η απώλεια της τάξης σύγκλισης σε προβλήματα με ασυνέχειες σε εσωτερικές γωνίες του πεδίου ορισμού οδήγησε στην προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένες κυβικές πολυωνυμικές συναρτήσεις και στην ανάπτυξη μίας κλασσικής τετάρτης τάξεως Hermite Collocation μεθόδου.

Παράλληλα μελετήσαμε τον υβριδικό συνδυασμό της Hermite Collocation μεθόδου με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (Interface Relaxation) καθώς επίσης και απεικονίσεις σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές που συνδυάζουν πολυπύρηνες CPUs και γραφικούς επιταχυντές GPUs.

Οι βασικές ερευνητικές δραστηριότητες της παρούσας δράσης απεικονίζονται γραφικά στο Σχ. 1 και περιγράφονται αναλυτικότερα στις παραγράφους που ακολουθούν.

Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια δράσεων 3 και 4).

1.1 Τα βασικά μαθηματικά εργαλεία (Building Blocks) της Δράσης 2.1

Για την ανάπτυξη νέων μεθόδων collocation με σκοπό την αντιμετώπιση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων, τα οποία χαρακτηρίζουν τα προβλήματα εφαρμογής (Εξέλιξη καρκινικών όγκων εγκεφάλου, Εισβολή θαλασσινού νερού σε παράκτιους υπόγειους υδροφορείς) και περιγράφονται γενικά από μία μη-γραμμική παραβολική ή ελλειπτική ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης στις διεπαφές,

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης ανέπτυξε κατ' αρχήν βασικά μαθηματικά εργαλεία τα οποία περιλαμβάνουν:

- Νέα κυβικά πολυώνυμα Hermite με ασυνεχή παράγωγο στις διεπαφές (derivative Discontinuous Hermite Cubic polynomials)
- Νέοι Βασικοί Collocation Πίνακες (Elemental Collocation Matrices - ECM) για την εισαγωγή και ανάπτυξη της νέας μεθόδου Collocation με ασυνεχή Hermite στοιχεία (derivative Discontinuous Hermite Collocation - dDHC)
- Γινόμενα Hadamard για την παραγωγή του σχετικού συστήματος Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ) της dDHC για μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.
- Kronecker Γινόμενα για την ανάπτυξη της dDHC στις 1+2 διαστάσεις
- Γενικευμένες πολυωνυμικές συναρτήσεις για την Προσέγγιση του Συντελεστή Διάχυσης σε προβλήματα στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες σε εσωτερικές γωνίες του πεδίου ορισμού.

Κατάλληλος συνδυασμός των ανωτέρω εργαλείων έκαναν εφικτή την ανάπτυξη της νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου, και την παραγωγή του σχετικού κατάλληλου συστήματος ΣΔΕ, για την επίλυση ενός Προβλήματος Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών Πολλαπλών Πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) για μία σειρά γενικευμένων περιπτώσεων που παρουσιάζονται στις παραγράφους που ακολουθούν.

1.2 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις

Η παραγωγή των νέων ECM και η χρήση γινομένων Hadamard επέτρεψαν την αποδοτική έκφραση του σχετικού μη-γραμμικού συστήματος ΣΔΕ που παράγει η dDHC μέθοδος όταν εφαρμόζεται για την επίλυση μη-γραμμικών ΠΑΣΣ-ΠΠ. Στη παράγραφο αυτή, ως επιστέγασμα της εξελικτικής πορείας ανάπτυξης της dDHC μεθόδου για προβλήματα στις 1+1 διαστάσεις, παρουσιάζουμε ολοκληρωμένα την εφαρμογή της dDHC μεθόδου και την παραγωγή του σχετικού μαθηματικού φορμαλισμού για την επίλυση ενός γενικευμένου μη-γραμμικού παραβολικού ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις. Επισημαίνουμε ότι η σύγκλιση της dDHC μεθόδου παραμένει τετάρτης τάξεως και δεν επηρεάζεται από την παρουσία ενός πεπερασμένου αριθμού ασυνεχών Hermite πολυωνύμων. Σημειώνουμε επίσης ότι τα προβλήματα αυτά περιγράφουν μια μεγάλη οικογένεια σημαντικών εφαρμογών στις περιοχές της μαθηματικής βιολογίας και ιατρικής, της γενετικής, της χημείας και πολλών άλλων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1.3 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, στις 1+2 διαστάσεις

Βασισμένοι αφενός μεν στο μαθηματικό φορμαλισμό που αναπτύξαμε στην προηγούμενη παράγραφο και αφετέρου στο μαθηματικό εργαλείο των Kronecker γινομένων, παρουσιάζουμε ολοκληρωμένα την εφαρμογή της dDHC μεθόδου και την παραγωγή του σχετικού μαθηματικού φορμαλισμού για την επίλυση ενός γενικευμένου μη-γραμμικού παραβολικού ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, στις 1+2 διαστάσεις. Επισημαίνουμε ότι η σύγκλιση της dDHC μεθόδου παραμένει, και σε αυτήν την οικογένεια προβλημάτων, τετάρτης τάξεως και δεν επηρεάζεται από την παρουσία ενός πεπερασμένου αριθμού ασυνεχών Hermite πολυωνύμων. Σημειώνουμε επίσης ότι τα προβλήματα αυτά περιγράφουν μια μεγάλη οικογένεια σημαντικών εφαρμογών στις περιοχές της μαθηματικής βιολογίας και ιατρικής, της γενετικής, και πολλών άλλων.

1.4 Το γενικό ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις: Η dDHC και η προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα κυβικά πολυώνυμα

Όπως επισημάναμε και στην Τεχνική Έκθεση 2014, η αντιμετώπιση του γενικού ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με την dDHC μέθοδο οδήγησε στην μείωση της τάξης σύγκλισης στη *γειτονιά* των γωνιακών ασυνεχειών. Για την αποκατάσταση της τάξης σύγκλισης της Collocation μεθόδου, όταν χρησιμοποιείται για την χωρική διακριτοποίηση του γενικού προβλήματος στις 1+2 διαστάσεις, θεωρήσαμε τη συνεχή βάση των δι-κυβικών πολυωνύμων Hermite ως συναρτήσεις βάσεις και κατασκευάσαμε νέα *γενικευμένα κυβικά* πολυώνυμα για να προσεγγίσουμε τον ασυνεχή συντελεστή διάχυσης του ΠΑΣΣ-ΠΠ. Η κατασκευή μίας νέας βάσης ασυνεχών πολυωνύμων Hermite που θα μας οδηγήσει στην ανάπτυξη μιας γενικευμένης dDHC μεθόδου αποτελεί έναν από τους μελλοντικούς μας στόχους.

1.5 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, έχει αναπτυχθεί ο απαραίτητος φορμαλισμός για την ανάπτυξη και εφαρμογή της μίας επαναληπτικής μεθόδου τύπου Collocation - ΜΧΔ για την επίλυση του γραμμικού ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις. Όπως έχουμε επισημάνει και στην Τεχνική Έκθεση 2014, παρατηρήσαμε ότι η νέα επαναληπτική μέθοδος συγκλίνει στην λύση που παράγει η dDHC με τετάρτης τάξης ταχύτητα. Η επέκταση του φορ-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

μαλισμού και η μελέτη της Collocation - ΜΧΔ στις 1+2 διαστάσεις αποτελεί έναν από τους μελλοντικούς μας στόχους.

1.6 IMEX Runge-Kutta και dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης CPU/GPU

Η ανάπτυξη της dDHC για προβλήματα στις 1+2 διαστάσεις και ο συνδυασμός της με τα κατάλληλα αριθμητικά σχήματα χρονικής διακριτοποίησης Runge-Kutta υψηλής ευστάθειας και τάξης, οδήγησε σε μεγάλα αραιά συστήματα γραμμικών εξισώσεων των οποίων η επίλυση απαιτεί σημαντικό υπολογιστικό χρόνο. Για την αποδοτικότερη επίλυσή τους καθίσταται, συνεπώς, απαραίτητη η ανάπτυξη παράλληλων αλγορίθμων για σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές. Η μελέτη ανάπτυξης παράλληλων αλγορίθμων για γραμμικά ΠΑΣΣ μας έχει απασχολήσει τόσο στα πλαίσια των Δράσεων 2.1 και 4.2 και έχουν παρουσιαστεί ήδη αποτελέσματα που επιταχύνουν τους υπολογισμούς και βελτιώνουν σημαντικά το υπολογιστικό κόστος.

Χρησιμοποιώντας τα ανωτέρω αποτελέσματα, στη παρούσα τεχνική έκθεση, παρουσιάζουμε την ανάπτυξη ενός παράλληλου αλγόριθμου για την αντιμετώπιση μη-γραμμικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις από την dDHC-IMEX RK μέθοδο. Ο αλγόριθμος αντιμετωπίζει το πρόβλημα σε ένα πρώτο επίπεδο χωρίς να λαμβάνει υπόψιν τη δομή των collocation πινάκων και απευθύνεται σε υπολογιστικές αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης με γραφικούς επιταχυντές. Η ερευνητική διαδικασία για την ανάπτυξη αλγορίθμων που θα εκμεταλλεύονται τη δομή των collocation πινάκων βρίσκεται σε εξέλιξη και αποτελεί έναν από τους μελλοντικούς μας στόχους.

2 Μεθοδολογία

2.1 Τα βασικά μαθηματικά εργαλεία (Building Blocks) της Δράσης 2.1

Στα πλαίσια της Δράσης 2.1, ασχοληθήκαμε με την ανάπτυξη ασυνεχών και υβριδικών μεθόδων Collocation για την επίλυση γραμμικών και μη-γραμμικών προβλημάτων πολλαπλών πεδίων. Για την ανάπτυξη των μεθόδων, θεωρήσαμε διάφορες μορφές της γενικής παραβολικής ΜΔΕ εξίσωσης που, χρησιμοποιώντας τους τελεστές $\mathcal{L}(\cdot)$ και $\mathcal{N}(\cdot)$ για να εκφράσουμε αντίστοιχα τους γραμμικούς και μη-γραμμικούς όρους πολυωνυμικού τύπου, γράφουμε ως:

$$c_t = \mathcal{L}\left[t, \boldsymbol{x}, c, D\nabla c\right] + \mathcal{N}\left[t, \boldsymbol{x}, c, D\nabla c\right] \quad , \quad \boldsymbol{x} \in \Omega \quad , \quad 0 < t \leq T \tag{1}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

και πλαισιώνουμε από Neumann συνοριακές συνθήκες και, φυσικά, από μία αρχική συνθήκη:

$$\frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \ , \ \ c(\boldsymbol{x}, 0) = f(\boldsymbol{x}) \ . \tag{2}$$

Τα προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων που μας ενδιαφέρουν χαρακτηρίζονται αφενός μεν από τον τμηματικά συνεχή συντελεστή διάχυσης $D \equiv D(\boldsymbol{x})$ και, αφετέρου, τις συνθήκες συνέχειας των συναρτήσεων $c \equiv c(\boldsymbol{x}, t)$ και $D\nabla c$ που απαιτούνται από τον παραβολικό χαρακτήρα του προβλήματος. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε σημείο διεπαφής $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{w} \in \Omega$ οι συνθήκες συνέχειας στην διεπαφή διατυπώνονται ως:

$$\begin{aligned} \lim_{\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{w}} c(\boldsymbol{x}, t) &= c(\boldsymbol{w}, t) \\ \lim_{x_i \to w_i^-} D(\boldsymbol{x}) \tfrac{\partial}{\partial x_i} c(\boldsymbol{x}, t) &= \lim_{x_i \to w_i^+} D(\boldsymbol{x}) \tfrac{\partial}{\partial x_i} c(\boldsymbol{x}, t) \ , \ \forall i \end{aligned} \tag{3}$$

Στις παραγράφους που ακολουθούν, παρουσιάζουμε με συντομία τα μαθηματικά εργαλεία που αναπτύξαμε για την επίλυση εξισώσεων τέτοιου τύπου.

2.1.1 Γενικευμένα Πολυώνυμα Hermite

Είναι γνωστό ότι τα κλασσικά κυβικά πολυώνυμα Hermite $V(s)$ και $S(s)$ στο διάστημα $[-1, 1]$, τα οποία χρησιμοποιούνται ως γεννήτριες για να παραγωγή της βάσης του Hermite υπόχωρου, ορίζονται από τις σχέσεις

$$V(s) = \begin{cases} \phi(-s) & , \ s \in [-1, 0] \\ \phi(s) & , \ s \in [0, 1] \\ 0 & , \ s \notin [-1, 1] \end{cases} \ , \tag{4}$$

και

$$S(s) = \begin{cases} -\psi(-s) & , \ s \in [-1, 0] \\ \psi(s) & , \ s \in [0, 1] \\ 0 & , \ s \notin [-1, 1] \end{cases} \ , \tag{5}$$

όπου

$$\phi(s) = (1 - s)^2(1 + 2s) \ , \ \ \psi(s) = s(1 - s)^2. \tag{6}$$

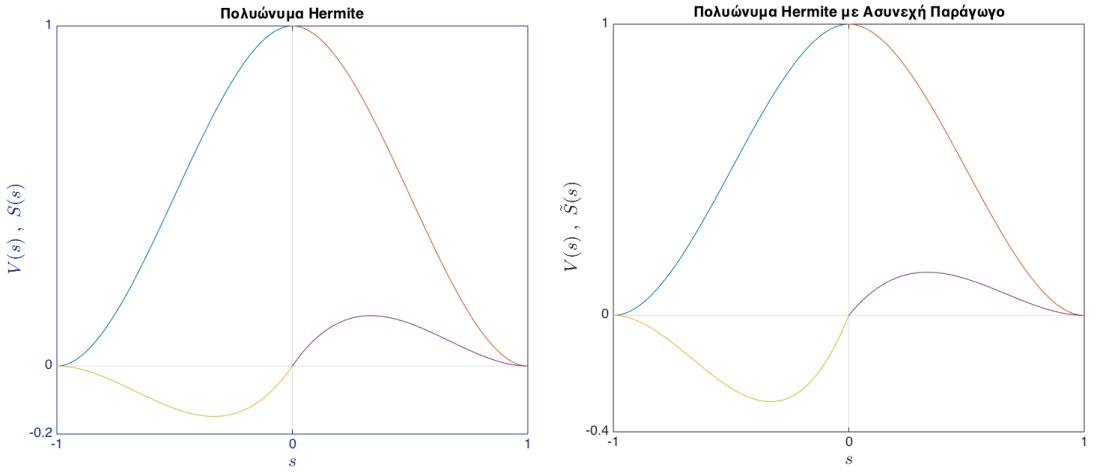
και απεικονίζονται στο Σχήμα 2a. Με βασικές ιδιότητες τις

$$V(-1) = V(1) = 0 \ , \ V(0) = 1 \ , \ V'(-1) = V'(0) = V'(1) = 0 \tag{7}$$

$$S(-1) = S(0) = S(1) = 0 \ , \ S'(-1) = S'(1) = 0 \ , \ S'(0) = 1, \tag{8}$$

τα πολυώνυμα Hermite χρησιμοποιούνται για την παρεμβολή/προσέγγιση συνεχών συναρτήσεων με συνεχή πρώτη παράγωγο.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(a) (b)

Σχήμα 2: (a) Συνεχή και (b) Γενικευμένα (ασυνεχής παράγωγος) Πολυώνυμα Hermite κόμβου $x_0 = 0$ στο [-1,1] για $\gamma_- = 0.5$ και $\gamma_+ = 1$.

Τα γενικευμένα κυβικά πολυώνυμα Hermite $V(s)$ και $\tilde{S}(s)$ στο διάστημα $[-1, 1]$, που απεικονίζονται στο Σχήμα 2b, ορίζονται αντίστοιχα από την (4) και την

$$\tilde{S}(s) = \begin{cases} \frac{-1}{\gamma_-}\psi(-s) & , \quad s \in [-1, 0] \ , \ \gamma_- \neq 0 \\ \frac{1}{\gamma_+}\psi(s) & , \quad s \in [0, 1] \ , \ \gamma_+ \neq 0 \\ 0 & , \quad s \notin [-1, 1] \end{cases} . \tag{9}$$

Παρατηρήστε ότι το πολυώνυμο $\tilde{S}(s)$ διατηρεί όλες τις ιδιότητες του $S(s)$ εκτός αυτής της παραγώγου στο μηδέν η οποία αντικαθίσταται από την

$$\lim_{s \to 0^-} \gamma_- \tilde{S}(s) = \lim_{s \to 0^+} \gamma_+ \tilde{S}(s) = 1. \tag{10}$$

Φυσικά ισχύει ότι

$$\gamma_- = \gamma_+ = 1 \Rightarrow \tilde{S}(s) \equiv S(s).$$

Η απεικόνιση των βασικών πολυωνύμων Hermite $V(s)$ και $\tilde{S}(s)$, με κέντρο το 0 και $s \in [-1, 1]$, στα κυβικά πολυώνυμα Hermite $V_j(x)$ και $\tilde{S}_j(x)$, με κέντρο τον κόμβο x_j και $x \in [x_{j-1}, x_{j+1}]$, δίνονται από τις σχέσεις

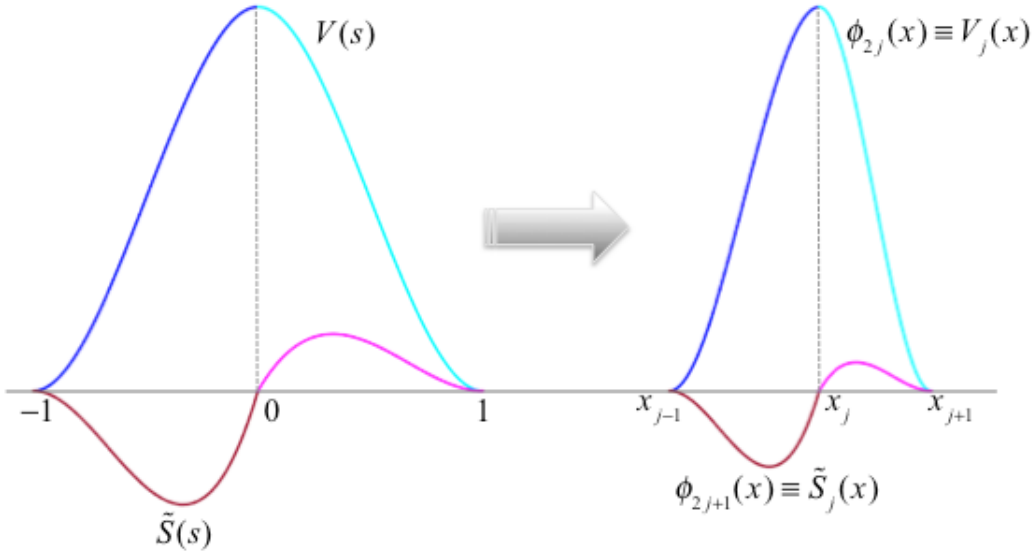
$$V_j(x) \equiv \phi_{2j}(x) = \begin{cases} \phi\left(\dfrac{x_j - x}{h_j}\right) & , \quad x \in [x_{j-1}, x_j] \\ \phi\left(\dfrac{x - x_j}{h_{j+1}}\right) & , \quad x \in [x_j, x_{j+1}] \\ 0 & , \quad x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}] \end{cases} , \tag{11}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

και

$$\tilde{S}_j(x) \equiv \phi_{2j+1}(x) \;=\; \begin{cases} -\dfrac{h_j}{\gamma_j}\psi\left(\dfrac{x_j - x}{h_j}\right) & , \quad x \in [x_{j-1}, x_j]\ ,\ \gamma_j \neq 0 \\ \dfrac{h_{j+1}}{\gamma_{j+1}}\psi\left(\dfrac{x - x_j}{h_{j+1}}\right) & , \quad x \in [x_j, x_{j+1}]\ ,\ \gamma_{j+1} \neq 0 \\ 0 & , \quad x \notin [x_{j-1}, x_{j+1}] \end{cases} \quad , \tag{12}$$

με $h_j = x_j - x_{j-1}$, και απεικονίζονται σχηματικά στο Σχήμα 3 που ακολουθεί.



Σχήμα 3: Γενικευμένα Πολυώνυμα Hermite με κέντρο το x_j και $x \in [x_{j-1}, x_{j+1}]$.

Ας θεωρήσουμε, τώρα, σε ένα διάστημα $I = [a, b]$ μία διαμέριση

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_N < x_{N+1} = b$$

αποτελούμενη από $N + 1$ υπο-διαστήματα $I_j = [x_{j-1}, x_j]$ μήκους $h_j = x_j - x_{j-1}$, $j = 1, \cdots, N + 1$, μία δοθείσα βηματική συνάρτηση $D \equiv D(x) = \gamma_j$, $x \in (x_{j-1}, x_j)$, $j = 1, \cdots, N + 1$, καθώς και τον σχετιζόμενο με την διαμέριση και συνάρτηση D διανυσματικό χώρο συναρτήσεων

$$\tilde{\mathcal{H}}_D = \left\{ \phi \;:\; \begin{array}{l} \phi \in C^0[a, b] \text{ και } \lim\limits_{x \to x_j^-} \gamma_j \phi'(x) = \lim\limits_{x \to x_j^+} \gamma_{j+1} \phi'(x) \\ \phi \text{ κυβικό πολυώνυμο σε κάθε } (x_{j-1}, x_j) \end{array} \right\} \tag{13}$$

όπου $\gamma_j \neq 0$, $j = 1, \cdots, N + 1$. Τον χώρο $\tilde{\mathcal{H}}_D$ θα τον καλούμε εφ' εξής διανυσματικό χώρο των *γενικευμένων (ως προς D) Hermite, συνεχών με κατά τμήμα*

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

συνεχή πρώτη παράγωγο και κατά τμήμα κυβικών συναρτήσεων στο I. Η διάσταση του χώρου $\tilde{\mathcal{H}}_D$ ικανοποιεί

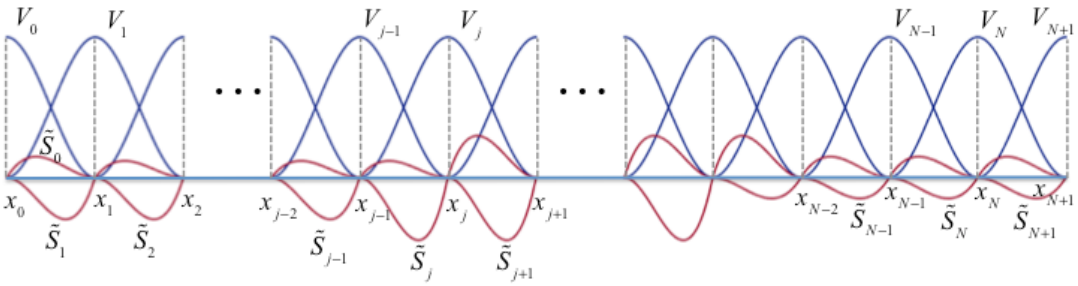
$$\dim(\tilde{\mathcal{H}}_D) = 4(N+1) - 2N = 2N + 4 = 2(N+2)$$

αφού έχουμε $4(N+1)$ ελεύθερους συντελεστές κυβικών πολυωνύμων εκ των οποίων $2N$ μπορούν να καθοριστούν από τις συνθήκες στους εσωτερικούς κόμβους. Είναι δε προφανές ότι οι συναρτήσεις $\{V_j, \tilde{S}_j\}$, $j = 0, \cdots, N+1$, που απεικονίζονται γραφικά στο Σχήμα 4, ανήκουν στον $\tilde{\mathcal{H}}_D$ και ότι, για $0 \le i, j \le N+1$,

$$V_j(x_i) = \delta_{i,j}\ ,\ V_j'(x_i) = 0\ ,\ \tilde{S}_j(x_i) = 0 \quad \text{και} \tag{14}$$

$$\begin{cases} \tilde{S}_j'(x_i) = 0 & , \quad i \neq j \\ \lim\limits_{x \to x_j^-} \gamma_j \tilde{S}'(x) = \lim\limits_{x \to x_j^+} \gamma_{j+1} \tilde{S}'(x) = 1 & , \quad i = j \end{cases} \tag{15}$$

όπου $\delta_{i,j}$ συμβολίζει το δέλτα του Kronecker.



Σχήμα 4: Οι συναρτήσεις $\{V_j, \tilde{S}_j\}$, $j = 0, \cdots, N+1$ του χώρου $\tilde{\mathcal{H}}_D$.

Επιπλέον αποδεικνύουμε ότι:

Λήμμα 1. *Το σύνολο των συναρτήσεων* $\{V_j, \tilde{S}_j\}$, $j = 0, \cdots, N+1$, *που ορίζονται στις σχέσεις* (11) - (12), *είναι γραμμικά ανεξάρτητο.*

Απόδειξη. Θεωρήστε τον γραμμικό συνδυασμό

$$G(x) = \sum_{j=0}^{N+1} c_j V_j(x) + d_j \tilde{S}_j(x) \in \text{span}\left\{V_j(x), \tilde{S}_j(x)\right\}_{j=0}^{N+1} \subseteq \tilde{\mathcal{H}}_D \tag{16}$$

και παρατηρήστε ότι $G(x) \in \tilde{\mathcal{H}}_D$ καθώς και ότι

$$G(x_j) = c_j \quad \text{και} \quad \gamma_j G_-'(x_j) = \gamma_{j+1} G_+'(x_j) = d_j \quad \text{για όλα τα } 0 \le j \le N+1 \tag{17}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όπου $G'_{\pm}(x_i) := \lim_{x \to x_i^{\pm}} G'(x)$. Επομένως, σε κάθε υποδιάστημα $I_k = [x_{k-1}, x_k]$, $1 \leq k \leq N+1$, ο γραμμικός συνδυασμός $G(x)$ είναι ένα κυβικό πολυώνυμο

$$G_k(x) := G(x)\,\big|_{[x_{k-1},x_k]} = a_{3,k}x^3 + a_{2,k}x^2 + a_{1,k}x + a_{0,k}\ ,$$

το οποίο φυσικά καθορίζεται μοναδικά από τις τιμές $G(x_{k-1})$, $G(x_k)$, $G'_+(x_{k-1})$ και $G'_-(x_k)$. Συνδυάζοντας τα παραπάνω, συνάγουμε ότι οι συντελεστές $a_{i,k}$ του κυβικού πολυωνύμου καθορίζονται από τη μοναδική λύση του ομαλού συστήματος

$$X_k \boldsymbol{a}_k = \Gamma_k \boldsymbol{c}_k \Rightarrow \boldsymbol{a}_k = X_k^{-1}\Gamma_k \boldsymbol{c}_k \tag{18}$$

όπου Γ_k είναι ο διαγώνιος πίνακας $\Gamma_k = \mathrm{diag}(1, 1, \frac{1}{\gamma_k}, \frac{1}{\gamma_k})$ και

$$X_k = \begin{bmatrix} x_{k-1}^3 & x_{k-1}^2 & x_{k-1} & 1 \\ x_k^3 & x_k^2 & x_k & 1 \\ 3x_{k-1}^2 & 2x_{k-1} & 1 & 0 \\ 3x_k^2 & 2x_k & 1 & 0 \end{bmatrix},\ \boldsymbol{a}_k = \begin{bmatrix} a_{3,k} \\ a_{2,k} \\ a_{1,k} \\ a_{0,k} \end{bmatrix} \text{ και } \boldsymbol{c}_k = \begin{bmatrix} c_{k-1} \\ c_k \\ d_{k-1} \\ d_k \end{bmatrix}. \tag{19}$$

Εκ των ανωτέρω συνάγεται ότι, για κάθε $1 \leq k \leq N+1$, ισχύει ότι

$$G_k(x) = 0 \text{ για όλα τα } x \in I_k \Longleftrightarrow \boldsymbol{a}_k = \boldsymbol{0} \Longleftrightarrow \boldsymbol{c}_k = \boldsymbol{0} \tag{20}$$

και συνεπώς

$$G(x) = 0 \text{ για όλα τα } x \in I \Longleftrightarrow c_j = d_j = 0 \text{ για όλα τα } 0 \leq j \leq N+1, \tag{21}$$

που ολοκληρώνει την απόδειξη. □

Και επιπλέον:

Λήμμα 2. *Το σύνολο των συναρτήσεων* $\{V_j, \tilde{S}_j\}$, $j = 0, \cdots, N+1$, *που ορίζονται στις σχέσεις* (11) - (12), *αποτελεί βάση του χώρου* $\tilde{\mathcal{H}}_D$.

Απόδειξη. Λαμβάνοντας υπόψιν το Λήμμα 1, αρκεί να αποδείξουμε ότι κάθε συνάρτηση $\phi(x)$ του $\tilde{\mathcal{H}}_D$ ικανοποιεί την σχέση

$$\phi(x) \in \tilde{\mathcal{H}}_D \Rightarrow \phi(x) \in \mathrm{span}\left\{V_j(x), \tilde{S}_j(x)\right\}_{j=0}^{N+1}.$$

Όμως η $\phi(x)$ είναι κυβικό πολυώνυμο σε κάθε υποδιάστημα $I_k = [x_{k-1}, x_k]$, $1 \leq k \leq N+1$, και καθορίζεται μοναδικά από τις τιμές $\phi(x_{k-1})$, $\phi(x_k)$, $\phi'_+(x_{k-1})$ και $\phi'_-(x_k)$. Συνεπώς

$$\phi(x) = \phi(x_0)V_0(x) + \gamma_1\phi'_+(x_0)\tilde{S}_0(x) + \sum_{j=1}^{N+1} \phi(x_j)V_j(x) + \gamma_j\phi'_-(x_j)\tilde{S}_j(x) \tag{22}$$

που ολοκληρώνει την απόδειξη. □

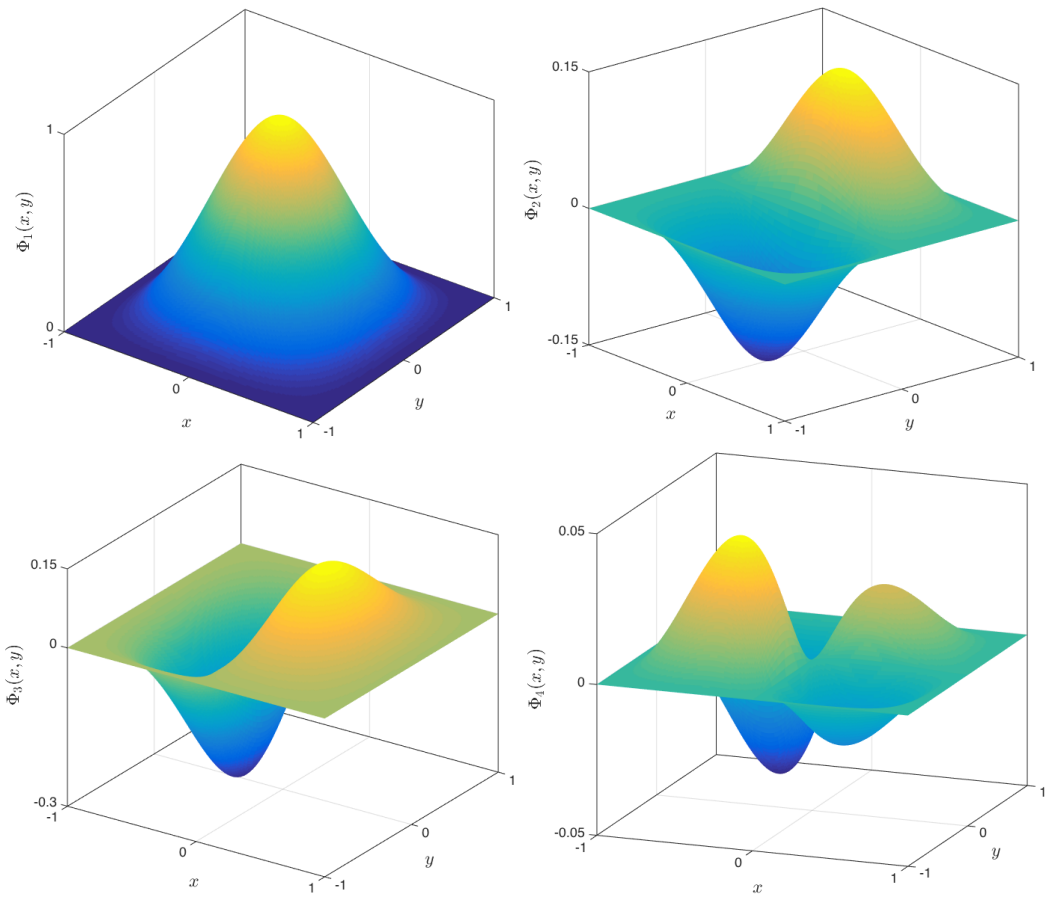
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Επισημαίνουμε ότι για την περιγραφή των ανωτέρω σε πιο συνεκτική μορφή θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί και η έννοια την *ασθενούς (weak) ή γενικευμένης παραγώγου*.

Η επέκταση των παραπάνω στην περίπτωση των δι-κυβικών γενικευμένων bi-Hermite στις δύο χωρικές διαστάσεις δίνεται με κατάλληλα γινόμενα των αντίστοιχων Hermite κυβικών πολυωνύμων στη μία διάσταση. Για παράδειγμα, εάν υποθέσουμε ότι στον κόμβο $(0,0)$ έχουμε ασυνέχεια μόνο ως προς την $x-$ κατεύθυνση τότε τα τέσσερα δι-κυβικά γενικευμένα Hermite που χρησιμοποιούμε ορίζονται σαν:

$$\begin{aligned} \Phi_1(x,y) = V(x)V(y) \quad &, \quad \Phi_2(x,y) = V(x)S(y) \\ \Phi_3(x,y) = \tilde{S}(x)V(y) \quad &, \quad \Phi_4(x,y) = \tilde{S}(x)S(y) \end{aligned} \tag{23}$$

και απεικονίζονται στο Σχήμα 5 που ακολουθεί.



Σχήμα 5: Γενικευμένα bi-Hermite Πολυώνυμα στο $[-1,1] \bigotimes [-1,1]$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η περαιτέρω θεωρητική διερεύνηση της συμπεριφοράς των γενικευμένων Hermite πολυωνύμων και ο καθορισμός της τάξης του σφάλματος παρεμβολής αποτελεί σημαντικό μελλοντικό στόχο.

2.1.2 Η μέθοδος derivative Discontinuous Hermite Collocation (dDHC)

Η χρήση των γενικευμένων (ασυνεχή παράγωγο) πολυωνύμων Hermite με την μέθοδο χωρικής διακριτοποίησης Collocation είναι το χαρακτηριστικό της νέας μεθόδου που ονομάζουμε derivative Discontinuous Hermite Collocation (dDHC). Στην ενότητα δε αυτή θα αναπτύξουμε τα βασικά μαθηματικά εργαλεία που την συνοδεύουν, δηλαδή τους πίνακες *στοιχείου (elemental)* καθώς και τους στοιχειώδεις collocation πίνακες παρεμβολής μάζας (mass), απόσβεσης (damping) και ακαμψίας (stiffness) στη μία διάσταση που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή των γενικών γραμμικών και μη-γραμμικών collocation πινάκων στις μία, δύο ή περισσότερες διαστάσεις.

Δοθέντος ενός βασικού προβλήματος μορφής (1) στη μία χωρική διάσταση, η μέθοδος dDHC αναζητά προσεγγιστικές λύσεις $\tilde{c}(x,t) \sim c(x,t)$ στο χώρο $\tilde{\mathcal{H}}_D$, δηλαδή της μορφής

$$\tilde{c}(x,t) = \sum_{j=0}^{N+1} [\alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x) + \alpha_{2j+1}(t)\phi_{2j+1}(x)] \tag{24}$$

όπου $\phi_{2j}(x)$ και $\phi_{2j+1}(x)$ είναι τα γενικευμένα κυβικά πολυώνυμα Hermite που ορίζονται από τις σχέσεις (11)-(12). Για τον καθορισμό των $2(N+2)$ αγνώστων $\{\alpha_{2j}(t), \alpha_{2j+1}(t)\}_{j=0}^{N+1}$ η dDHC μέθοδος απαιτεί

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = \mathcal{L}\left[t, \sigma_i, \tilde{c}, D\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}\right] + \mathcal{N}\left[t, \sigma_i, \tilde{c}, D\frac{d\tilde{c}}{dx}\right] \ , \ i = 1, \cdots, 2N+2 \tag{25}$$

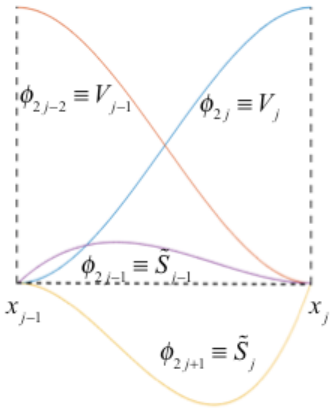
σε $2(N+1)$ εσωτερικά collocation σημεία σ_i (δύο σε κάθε υποδιάστημα), καθώς και

$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} = 0 \ , \ x = a, b \Rightarrow \alpha_1(t) = \alpha_{2N+3}(t) = 0. \tag{26}$$

Σχετικά, τώρα, με το σύστημα Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ), ή αλγεβρικών εξισώσεων στην περίπτωση ελλειπτικών τελεστών σε προβλήματα σταθερής κατάστασης (steady state), που περιγράφεται στην (25), παρατηρήστε καταρχήν ότι οι μη-μηδενικές συναρτήσεις βάσης σε κάθε στοιχείο $I_j = [x_{j-1}, x_j]$, $j = 1, \cdots, N+1$, είναι μόνον οι $\phi_{2j-2}(x)$, $\phi_{2j-1}(x)$, $\phi_{2j}(x)$ και $\phi_{2j+1}(x)$, όπως επιδεικνύουμε και γραφικά στο Σχήμα 6, και επομένως ισχύει ότι

$$\tilde{c}(\sigma_i, t) = \sum_{k=2j-2}^{2j+1} \alpha_k(t)\phi_k(\sigma_i) \ , \text{ για κάθε } \sigma_i \in (x_{j-1}, x_j) \ , \ j = 1, \cdots, N+1. \tag{27}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 6: Οι συναρτήσεις βάσης του στοιχείου $I_j = [x_{j-1}, x_j]$, $j = 1, \cdots, N+1$.

Συνεπώς, εάν συμβολίσουμε με

$$\tilde{c}_j^{(m)}(x,t) = \frac{\partial^m}{\partial x^m}\tilde{c}(x,t)|_{x\in I_j} \ , \quad j = 1, \cdots, N+1 \ , \ m = 0,1,2 \ , \tag{28}$$

τότε τα δομικά στοιχεία που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή του συστήματος (25) είναι καταρχήν οι δύο εξισώσεις στοιχείου (elemental) που αντιστοιχούν στις βασικές παραγώγους της $\tilde{c}_j^{(m)}(\sigma_i, t)$, δηλαδή

$$\tilde{c}^{(m)}(\sigma_i,t) = \sum_{k=2j-2}^{2j+1} \alpha_k(t)\phi_k^{(m)}(\sigma_i) = C_j^{(m)}\boldsymbol{\alpha}_j \ , \ i = 2j-1, 2j \ , \ j = 1, \cdots, N+1 \tag{29}$$

όπου

$$C_j^{(m)} = \left[\begin{array}{cc} A_j^{(m)} & B_j^{(m)} \end{array} \right] \ , \quad m = 0,1,2 \tag{30}$$

$$\boldsymbol{\alpha}_j = \left[\begin{array}{cccc} \alpha_{2j-2}(t) & \alpha_{2j-1}(t) & \alpha_{2j}(t) & \alpha_{2j+1}(t) \end{array} \right]^{\mathsf{T}} \tag{31}$$

με

$$A_j^{(m)} = \left[\begin{array}{cc} \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{array} \right] \ , \quad m = 0,1,2 \tag{32}$$

and

$$B_j^{(m)} = \left[\begin{array}{cc} \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{array} \right] \ , \quad m = 0,1,2 \ . \tag{33}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σημειώνουμε ότι στην περίπτωση κατά την οποία ως εσωτερικά collocation σημεία επιλεγούν τα σημεία Gauss, δηλαδή

$$\sigma_{\pm} = x_j + \frac{h_j}{2}\left(1 \pm \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \tag{34}$$

τότε

$$A_j^{(m)} = \frac{1}{h_j^m}\begin{bmatrix} s_1^{(m)} & \frac{h_j}{\gamma_j}s_2^{(m)} \\ s_3^{(m)} & -\frac{h_j}{\gamma_j}s_4^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0,1,2 \tag{35}$$

$$B_j^{(m)} = \frac{1}{h_j^m}\begin{bmatrix} s_3^{(m)} & \frac{h_j}{\gamma_j}s_4^{(m)} \\ s_1^{(m)} & -\frac{h_j}{\gamma_j}s_2^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0,1,2 \tag{36}$$

με

	$m=0$	$m=1$	$m=2$
$s_1^{(m)}$	$\frac{9+4\sqrt{3}}{18}$	-1	$-2\sqrt{3}$
$s_2^{(m)}$	$\frac{3+\sqrt{3}}{36}$	$\frac{\sqrt{3}}{6}$	$-1-\sqrt{3}$
$s_3^{(m)}$	$\frac{9-4\sqrt{3}}{18}$	1	$2\sqrt{3}$
$s_4^{(m)}$	$-\frac{3-\sqrt{3}}{36}$	$-\frac{\sqrt{3}}{6}$	$-1+\sqrt{3}$

.

Τέλος, συμβολίζοντας με $\tilde{c}^{(m)}(x,t)$, την ασθενή $m-$παράγωγο της $\tilde{c}(x,t)$ ως προς x, δηλαδή

$$\tilde{c}^{(m)}(x,t) = \begin{cases} \tilde{c}_1^{(m)}(x,t) & , \quad x \in I_1 \\ \vdots & \\ \tilde{c}_j^{(m)}(x,t) & , \quad x \in I_j \\ \vdots & \\ \tilde{c}_{N+1}^{(m)}(x,t) & , \quad x \in I_{N+1} \end{cases}, \quad m = 0,1,2 \tag{37}$$

έχουμε ότι, για $i = 1, \cdots, 2N+2$,

$$\tilde{c}^{(m)}(\sigma_i,t) = \alpha_0(t)\phi_0^{(m)}(\sigma_i) + \sum_{k=2}^{2N+2}\alpha_k(t)\phi_k^{(m)}(\sigma_i) = C_m\boldsymbol{\alpha}\ , \ m = 0,1,2\ , \tag{38}$$

όπου οι $(2N+2)\times(2N+2)$ στοιχειώδεις collocation πίνακες C_m ορίζονται ως:

$$C_m = \begin{bmatrix} \tilde{A}_1^{(m)} & B_1^{(m)} & & & & \\ & A_2^{(m)} & B_2^{(m)} & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & A_N^{(m)} & B_N^{(m)} & \\ & & & & A_{N+1}^{(m)} & \tilde{B}_{N+1}^{(m)} \end{bmatrix} \tag{39}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ενώ το διάνυσμα των αγνώστων $\boldsymbol{\alpha} \equiv \boldsymbol{\alpha}(t)$, διάστασης $2N+2$, περιγράφεται ως:

$$\boldsymbol{\alpha} = \left[\begin{array}{cccc} \alpha_0(t) & \alpha_2(t) & \cdots & \alpha_{2N+1}(t) & \alpha_{2N+2}(t) \end{array} \right]^{\mathsf{T}}. \tag{40}$$

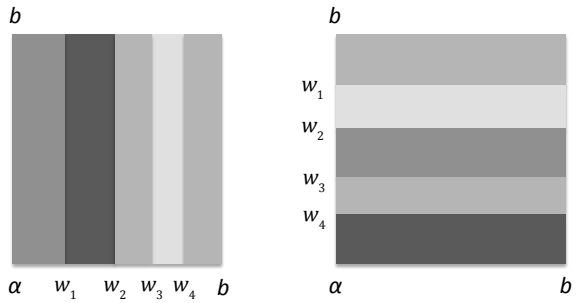
Τα διανύσματα $\tilde{A}_1^{(k)}$ και $\tilde{B}_{N+1}^{(k)}$ αποτελούνται από την πρώτη στήλη των πινάκων $A_1^{(k)}$ και $B_{N+1}^{(k)}$ αντίστοιχα, αφού η δεύτερη τους στήλη έχει διαγραφεί λόγω των μηδενικών συνοριακών συνθηκών (26).

2.1.3 Η dDHC μέθοδος στις 2 χωρικές διαστάσεις: Χρήση Kronecker Γινομένων

Επεκτείνοντας τον συμβολισμό που αναπτύξαμε ανωτέρω για την μία χωρική διάσταση, η μέθοδος dDHC στις δύο χωρικές διαστάσεις αναζητά προσεγγίσεις $\tilde{c}(x,y,t) \sim c(x,y,t)$ της μορφής

$$\tilde{c}(x,y,t) = \sum_{i=0}^{2N_x+3} \sum_{j=0}^{2N_y+3} \alpha_{i,j}(t) \Phi_{i,j}(x,y) \tag{41}$$

όπου οι *derivative discontinuous Hermite bicubic συναρτήσεις βάσης* $\Phi_{i,j}(x,y)$ αποτελούν κατάλληλους μετασχηματισμούς των γενικευμένων δι-κυβικών πολυωνύμων (23) στον κόμβο (x_i, y_j). Για μία ενδιαφέρουσα κατηγορία προβλημάτων πολλαπλών πεδίων, όπου ο συντελεστής διάχυσης παρουσιάζει ασυνέχειες μόνο στη μία διάσταση, με αποτέλεσμα η γραφική του παράσταση να μοιάζει με οριζόντιες ή κατακόρυφες λωρίδες (stripes), όπως επιδεικνύεται και στο Σχήμα 7, οι στοιχειώδεις collocation πίνακες μπορούν να σχηματισθούν μέσω Kronecker γινομένων των αντίστοιχων μονοδιάστατων πινάκων με σημαντικά υπολογιστικά οφέλη.



Σχήμα 7: Ο συντελεστής διάχυσης D στα προβλήματα τύπου Stripes.

Το βασικό δομικό στοιχείο που αναπτύξαμε για τα προβλήματα της κατηγορίας αυτής παρατίθεται στη συνεχεία υπό μορφήν του εξής Λήμματος:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Λήμμα 3. *Για προβλήματα πολλαπλών πεδίων τύπου stripes, οι στοιχειώδεις Collocation πίνακες που αντιστοιχούν στην μερική παράγωγο (με την ασθενή έννοια)* $\dfrac{\partial^{m+n}}{\partial x^m \partial y^n}\tilde{c}(x,y,t)$, *με* $m,n = 0,1,2$ *και* $m+n \leq 2$, *υπολογισμένη στα εσωτερικά collocation σημεία* (σ_i,σ_j), $i = 1,\cdots,2N_x+2$ *και* $j = 1,\cdots,2N_y+2$, *δίδονται από τις σχέσεις*

$$\frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m \partial y^n}\tilde{c}(\sigma_i,\sigma_j,t) = C_{\tilde{m}n}\boldsymbol{a} = \left(\tilde{C}_m \otimes C_n\right)\boldsymbol{a} \tag{42}$$

για το πρόβλημα των κατακόρυφων Stripes, και

$$\frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m \partial y^n}\tilde{c}(\sigma_i,\sigma_j,t) = C_{m\tilde{n}}\boldsymbol{a} = \left(C_m \otimes \tilde{C}_n\right)\boldsymbol{a} \tag{43}$$

για το πρόβλημα των οριζόντιων Stripes αντίστοιχα. Οι πίνακες C_m *και* $\tilde{C}_m$ *συμβολίζουν αντίστοιχα τη χρήση συνεχών (δηλ.* $\gamma_j = 1,\ \forall j$*) και γενικευμένων Hermite πολυωνύμων στην σχέση* (39).

2.1.4 Η dDHC μέθοδος για μη-γραμμικά προβλήματα: Χρήση Γινομένων Hadamard

Ένα ακόμη δομικό εργαλείο που αναπτύξαμε και αξίζει να αναφερθεί, είναι η χρήση γινομένων Hadamard για την ανάπτυξη του κατάλληλου μαθηματικού φορμαλισμού στην διαδικασία δημιουργίας των collocation πινάκων που αντιστοιχούν σε μη-γραμμικούς όρους στις μία ή περισσότερες διαστάσεις. Σημειώνουμε ότι τα υπολογιστικά οφέλη είναι σημαντικά, ιδιαίτερα για τις κατηγορίες προβλημάτων τύπου stripes, όπου επιτυγχάνεται συνδυαστική χρήση των Kronecker και των Hadamard γινομένων των μονοδιάστατων πινάκων που ορίσαμε στην σχέση (39).

Παραθέτουμε αμέσως τα σχετικά αποτελέσματα υπό την μορφή των δύο Λημμάτων που ακολουθούν:

Λήμμα 4. *Οι στοιχειώδεις Collocation πίνακες που αντιστοιχούν σε μη-γραμμικούς όρους, πολυωνυμικού τύπου, της παραγώγου (με την ασθενή έννοια)*

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m}\tilde{c}(x,t)\right)^{m_\ell}\left(\frac{\partial^n}{\partial x^n}\tilde{c}(x,t)\right)^{n_\ell},$$

με $m,n = 0,1,2$ *και* $m_\ell, n_\ell \in \mathbb{N}$, *υπολογισμένη στα εσωτερικά collocation σημεία* σ_i, $i = 1,\cdots,2N+2$, *μπορούν να εκφραστούν ως το γινόμενο Hadamard των αντίστοιχων collocation πινάκων* C_m *και* C_n, *όπως ορίζονται στην* (39), *μέσω της σχέσης*

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m}\tilde{c}(\sigma_i,t)\right)^{m_\ell}\left(\frac{\partial^n}{\partial x^n}\tilde{c}(\sigma_i,t)\right)^{n_\ell} = \left(C_m\boldsymbol{\alpha}\right)^{\circ m_\ell} \circ \left(C_n\boldsymbol{\alpha}_j\right)^{\circ n_\ell}.$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Λήμμα 5. *Για προβλήματα πολλαπλών πεδίων τύπου stripes με ασυνέχειες στην x-κατεύθυνση (κατακόρυφες λωρίδες), οι στοιχειώδεις Collocation πίνακες που αντιστοιχούν σε μη-γραμμικούς όρους, πολυωνυμικού τύπου, της μερικής παραγώγου (με την ασθενή έννοια)*

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m}\tilde{c}(x,y,t)\right)^{m_\ell}\left(\frac{\partial^n}{\partial y^n}\tilde{c}(x,y,t)\right)^{n_\ell},$$

όπου $m,n=0,1,2$ και $m_\ell,n_\ell\in\mathbb{N}$, υπολογισμένη στα εσωτερικά collocation σημεία (σ_i,σ_j), $i=1,\cdots,2N_x+2$ και $j=1,\cdots,2N_y+2$, μπορούν να εκφραστούν ως συνδυασμός Kronecker και Hadamard γινομένων των αντίστοιχων collocation πινάκων C_m, C_n και C_0, όπως ορίζονται στην (39)*, μέσω της σχέσης*

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m}\tilde{c}(\sigma_i,\sigma_j,t)\right)^{m_\ell}\left(\frac{\partial^n}{\partial y^n}\tilde{c}(\sigma_i,\sigma_j,t)\right)^{n_\ell}=\left[\left(\tilde{C}_m\otimes C_0\right)\boldsymbol{a}\right]^{\circ m_\ell}\circ\left[\left(\tilde{C}_0\otimes C_n\right)\boldsymbol{a}\right]^{\circ n_\ell}.$$

Σημειώνουμε ότι οι πίνακες C_m και $\tilde{C}_m$ συμβολίζουν αντίστοιχα τη χρήση συνεχών (δηλ. $\gamma_j=1,\ \forall j$) και γενικευμένων Hermite πολυωνύμων στην σχέση (39) καθώς και ότι για την περίπτωση ασυνεχειών στην y-κατεύθυνση (οριζόντιες stripes) μία ανάλογη σχέση ισχύει και μπορεί εύκολα να παραχθεί.

2.1.5 Προσέγγιση του ασυνεχούς Συντελεστή Διάχυσης με συνεχείς συναρτήσεις στις μία και δύο διαστάσεις

Ένα τελευταίο δομικό εργαλείο που αναπτύξαμε (βλ. Τεχνική Έκθεση 2014) και παραθέτουμε είναι η προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με συνεχή γενικευμένα πολυώνυμα στις μία και δύο διαστάσεις. Η προσέγγιση αυτή επιτρέπει την χρήση της collocation μεθόδου με τα κλασσικά συνεχή κυβικά Hermite πολυώνυμα (δηλ. $\gamma_j=1,\ \forall j$). Αξίζει δε να σημειωθεί ότι επιτρέπει την χρήση Kronecker γινομένων ακόμη και όταν οι ασυνέχειες παρουσιάζονται ταυτόχρονα και στις δύο κατευθύνσεις (εσωτερικές γωνίες).

Στα προβλήματα μίας διάστασης, ο συντελεστής διάχυσης έχει τη γενική μορφή $D=D(x)=\gamma_k\in\mathbb{R}$ για $x\in[w_{k-1},w_k]\ ,\ \ k=1,\ldots,K+1$ (βλ. Σχήμα 11) και προσεγγίζεται από μία συνεχή συνάρτηση $\tilde{D}$ που ορίζεται ως

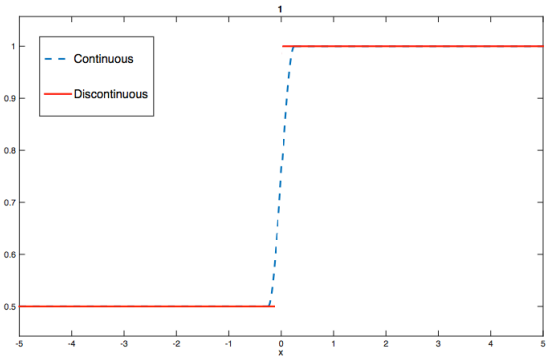
$$\tilde{D}=\tilde{D}(x)=\begin{cases}\gamma_1 & , \ x\in(\alpha,w_1-\epsilon)\\ p_1(x) & , \ x\in(w_1-\epsilon,w_1+\epsilon)\\ \gamma_2 & , \ x\in(w_1+\epsilon,w_2-\epsilon)\\ p_2(x) & , \ x\in(w_2-\epsilon,w_2+\epsilon)\\ \vdots & \vdots \ \vdots\\ p_k(x) & , \ x\in(w_K-\epsilon,w_K+\epsilon)\\ \gamma_{K+1} & , \ x\in(w_K+\epsilon,b)\end{cases} \tag{44}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όπου $p_k(x)$ για $k = 1, \ldots, K$ είναι κυβικά πολυώνυμα που ορίζονται μοναδικά από τις σχέσεις

$$p_k(w_k - \epsilon) = \gamma_k \ , \ \ p_k(w_k + \epsilon) = \gamma_{k+1} \ , \ \ p'_k(w_k - \epsilon) = p'_k(w_k + \epsilon) = 0$$

Στο Σχ. (8) που ακολουθεί, δείχνουμε τον συνεχή και τον ασυνεχή συντελεστή διάχυσης για ένα σημείο διεπαφής.

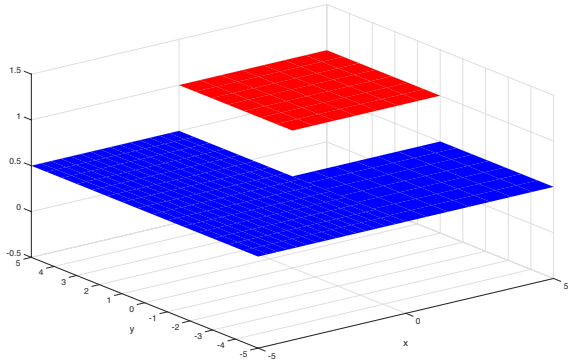


Σχήμα 8: Η προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με κυβικό πολυώνυμο.

Για τα προβλήματα δύο διαστάσεων, ας θεωρήσουμε την απλή περίπτωση όπου ο συντελεστής διάχυσης D ορίζεται ως:

$$D = \begin{cases} 1 & , \ (x, y) \in (w, b] \times (w, b] \\ \gamma & , \ (x, y) \notin (w, b] \times (w, b] \end{cases}$$

και προφανώς χαρακτηρίζεται από μία γωνιακή ασυνέχεια στο σημείο (w, w), όπως χαρακτηριστικά επιδεικνύεται στο Σχήμα 9.

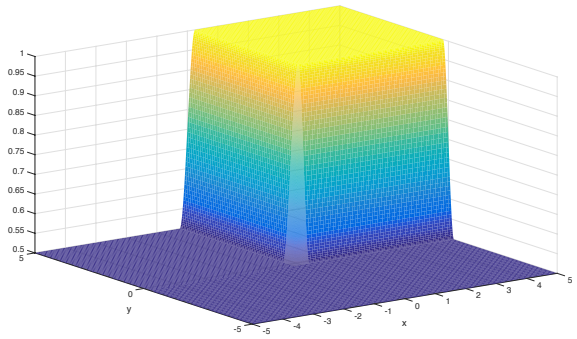


Σχήμα 9: Ο συντελεστής διάχυσης στις δύο διαστάσεις με μία γωνιακή ασυνέχεια.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τότε, υποθέτοντας, ότι έχουμε ομοιόμορφη διαμέριση και στις δύο κατευθύνσεις μήκους h, και θεωρώντας κατάλληλες συνθήκες κατά μήκος της γραμμής ασυνέχειας, μπορούμε να κατασκευάσουμε μία γενικευμένη πολυωνυμική συνάρτηση $\tilde{D}(x,y)$ που προσεγγίζει τον συντελεστή διάχυσης D. Η γενική της μορφής ικανοποιεί τη σχέση:

$$\tilde{D} = \begin{cases} 1 & , \ (x,y) \in (w+\varepsilon, b] \times (w+\varepsilon, b] \\ p(x) & , \ (x,y) \in (w-\varepsilon, w+\varepsilon] \times (w+\varepsilon, b] \\ q(y) & , \ (x,y) \in (w+\varepsilon, b] \times (w-\varepsilon, w+\varepsilon] \\ c(x,y) & , \ (x,y) \in (w-\varepsilon, w+\varepsilon] \times (w-\varepsilon, w+\varepsilon] \\ \gamma & , \ \text{διαφορετικά} \end{cases}$$



Σχήμα 10: Πολυωνυμική προσέγγιση $\tilde{D}$ του συντελεστής διάχυσης D.

όπου $p(x) = \sum_{i=0}^{i=3} p_i x^i$, $q(y) = \sum_{j=0}^{j=3} q_j y^j$ είναι κυβικά πολυώνυμα, ως προς x και ως προς y αντίστοιχα, που ορίζονται όπως αυτά που χρησιμοποιήσαμε στη μονοδιάστατη περίπτωση, ενώ στη περιοχή της γωνίας χρησιμοποιούμε ένα γενικευμένο κυβικό πολυώνυμο δύο διαστάσεων της μορφής $c(x,y) = \sum_{i=0}^{i=3} \sum_{j=0}^{j=3} c_{ij} x^i y^j$.

2.2 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις

Προβλήματα πολλαπλών περιοχών/πεδίων που περιγράφουν αρκετές εφαρμογές όπως, η βιολογική εισβολή, η μόλυνση στο περιβάλλον, ροή ρευστών και καυσαερίων κ.α. μπορούν να περιγραφούν με μια γενική κλάση μη γραμμικών

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

παραβολικών εξισώσεων της μορφής (1)

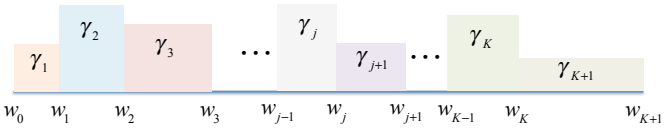
$$\begin{aligned} &\frac{\partial c}{\partial t} = \mathcal{L}\left[\, t, x, c, D\frac{\partial c}{\partial x}\,\right] + \mathcal{N}\left[\, t, x, c, D\frac{dc}{dx}\,\right] \ , \ a < x < b \ , \ t > 0 \\ &c(x,0) = c_0(x) \\ &\frac{\partial c}{\partial x}(x,t) \mid_{x=a} = \frac{\partial c}{\partial x}(x,t) \mid_{x=b} = 0 \end{aligned} \tag{45}$$

όπου ο γραμμικός και ο μη γραμμικός τελεστής πολυωνυμικού τύπου $\mathcal{L}[\cdot]$ και $\mathcal{N}[\cdot]$ αντίστοιχα, ορίζονται απο:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[c] &= f_1 \ \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right) + f_2 \ \left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right) + f_3 \ c \ , \\ \mathcal{N}[c] &= q\left(x, t, c, \left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)\right) = \sum_{\ell=1}^{P} g_\ell c^{m_\ell} \left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)^{n_\ell} \ , \end{aligned} \tag{46}$$

με $c \equiv c(x,t)$ να είναι συνεχής συνάρτηση, οι $f_i \equiv f_i(x,t)$ και $g_\ell \equiv g_\ell(x,t)$ να είναι επαρκώς ομαλές, και m_ℓ, n_ℓ, P μη αρνητικοί ακέραιοι μεγαλύτεροι του ένα.

Ο συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x)$ είναι ασυνεχής και χαρακτηρίζει την φύση του προβλήματος πολλαπλών περιοχών. Για τον ορισμό του, θεωρούμε K εσω-



Σχήμα 11: Ο συντελεστής διάχυσης στις $K+1$ υποπεριοχές

τερικά σημεία διεπαφής w_k στο χωρίο $[a,b]$ τα οποία ορίζουν $K+1$ περιοχές διάχυσης. Ειδικότερα, θεωρούμε

$$a = w_0 < w_1 < \cdots < w_k < \cdots < w_K < w_{K+1} = b,$$

και ορίζουμε τα υποχωρία,

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) \ , \quad k = 1, \ldots, K+1 \ . \tag{47}$$

Τότε, ο συντελεστής διάχυσης D ορίζεται ως

$$D(x) = \gamma_k \in \mathbb{R} \ \text{ για } \ x \in \mathcal{W}_k \ , \quad k = 1, \ldots, K+1 \ . \tag{48}$$

Για την ανάπτυξη της dDHC μεθόδου, θεωρούμε μία ομοιόμορφη διαμέριση σε κάθε ένα από τα $k = 1, \ldots, K+1$ υποχωρία $\overline{\mathcal{W}}_k = [w_{k-1}, w_k]$ σε N_k υποδιαστήματα μήκους

$$h_k := \frac{w_k - w_{k-1}}{N_k} \ . \tag{49}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ώστε

$$[a,b] = \bigcup_{j=1}^{N+1} I_j \ , \quad I_j = [x_{j-1}, x_j] \tag{50}$$

με

$$x_j = a + j\ h_j(k) \quad , \quad j = 0, \ldots, N+1 \ , \tag{51}$$

όπου

$$N = \sum_{k=1}^{K+1} N_k \ \text{ and } \ h_j(k) = h_k \ \text{when} \ I_j \subseteq \overline{\mathcal{W}}_k \ , \tag{52}$$

για $k = 1, \ldots, K+1$.

Όπως αναπτύξαμε στη παράγραφο 2.1.2, η μέθοδος dDHC αναζητά προσεγγιστικές λύσεις $\tilde{c}(x,t) \sim c(x,t)$ στο χώρο $\tilde{\mathcal{H}}_D$, όπου $\tilde{c}(x,t)$ έχει τη μορφή (24), δηλαδή

$$\tilde{c}(x,t) = \sum_{j=0}^{N+1} [\alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x) + \alpha_{2j+1}(t)\phi_{2j+1}(x)]$$

όπου $\phi_{2j}(x)$ και $\phi_{2j+1}(x)$ είναι τα γενικευμένα κυβικά πολυώνυμα Hermite που ορίζονται από τις σχέσεις (11)-(12). Εύκολα κανείς μπορεί να διαπιστώσει ότι,

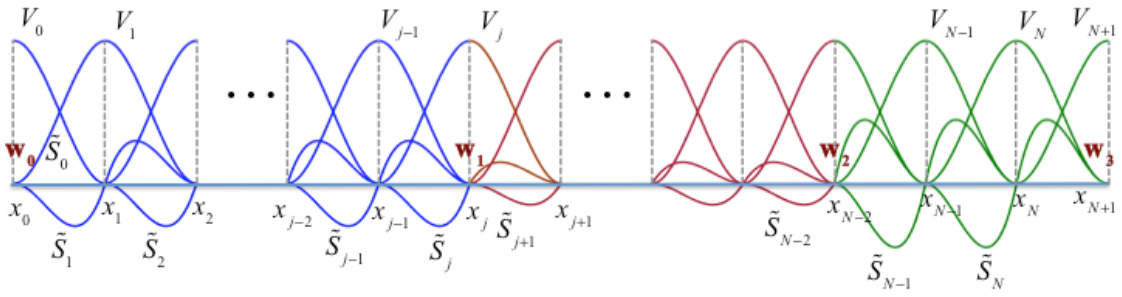
$$u(x_j, t) = a_{2j}(t), \tag{53}$$

$$u_x(x_j,t) = \begin{cases} a_{2j+1}(t)/\gamma_k & , \ \text{if } x_j \in W_k \bigwedge x_j \neq w_k \ \ \forall k \\ a_{2j+1}(t)/\gamma_{k+1} & , \ \text{if } x_j \in W_{k+1} \bigwedge x_j \neq w_k \ \ \forall k \end{cases} , \tag{54}$$

ενώ, για κάθε $x_j = w_k$, ισχύει

$$\lim_{x \to w_k^-} \gamma_k u_x(x,t) = \lim_{x \to w_k^+} \gamma_{k+1} u_x(x,t) = a_{2k+1}(t). \tag{55}$$

Με στόχο τον υπολογισμό των αγνώστων μεταβλητών $\alpha_i \equiv \alpha_i(t)$, $i = 0, \ldots, 2(N+1)$ προχωράμε στην κατασκευή του συστήματος ΣΔΕ που παράγει η Collocation μέσω της κατάλληλης προσαρμογής των δομικών στοιχείων



Σχήμα 12: Η ασυνεχής βάση Hermite για τρεις περιοχές W_k

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

που έχουμε αναπτύξει σε προηγούμενες ενότητες. Πιο συγκεκριμένα, παρατηρούμε ότι σε κάθε στοιχείο I_j οι δύο elemental collocation εξισώσεις ικανοποιούν την εξίσωση

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \dot{\alpha}_L(t)\phi_L(\sigma_i) = \mathcal{L}\left[\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L(\sigma_i)\right] + \mathcal{N}\left[\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L(\sigma_i)\right] \tag{56}$$

για $i = 2j-1\ ,\ 2j$, όπου

$$\begin{aligned}\mathcal{L}\left[\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L(\sigma_i)\right] &= f_1(\sigma_i,t)\gamma_j \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L''(\sigma_i) + f_2(\sigma_i,t)\gamma_j \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L'(\sigma_i) \\ &\quad + f_3(\sigma_i,t) \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L(\sigma_i)\end{aligned} \tag{57}$$

και

$$\begin{aligned}\mathcal{N}\left[\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L(\sigma_i)\right] = \sum_{\ell=1}^{k} \Bigg\{ & g_\ell(\sigma_i,t) \left(\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L(\sigma_i)\right)^{m_\ell} \\ & \left(\gamma_j \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L'(\sigma_i)\right)^{n_\ell} \Bigg\}\end{aligned} . \tag{58}$$

Συνεπώς, γράφοντας την εξίσωση (56) σε διανυσματική μορφή ως:

$$\begin{aligned}C_j^{(0)}\dot{\boldsymbol{\alpha}}_j &= \gamma_j \boldsymbol{f_{1_j}} \circ \left(C_j^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_j\right) + \gamma_j \boldsymbol{f_{2_j}} \circ \left(C_j^{(1)}\boldsymbol{\alpha}_j\right) \\ &\quad + \boldsymbol{f_{3_j}} \circ \left(C_j^{(0)}\boldsymbol{\alpha}_j\right) \\ &\quad + \sum_{\ell=1}^{k} \left\{\gamma_j \boldsymbol{g_{\ell_j}} \circ \left(C_j^{(0)}\boldsymbol{\alpha}_j\right)^{\circ m_\ell} \circ \left(C_j^{(1)}\boldsymbol{\alpha}_j\right)^{\circ n_\ell}\right\}\end{aligned} \tag{59}$$

όπου $C_j^{(m)}$ ορίζονται στην (30) και

$$\boldsymbol{f_{i_j}} = \begin{bmatrix} f_i(\sigma_{2j-1},t) \\ f_i(\sigma_{2j},t) \end{bmatrix}_{i=1,2,3} \quad \text{και} \quad \boldsymbol{g_{\ell_j}} = \begin{bmatrix} g_\ell(\sigma_{2j-1},t) \\ g_\ell(\sigma_{2j},t) \end{bmatrix},$$

το collocation σύστημα ΣΔΕ που αντιστοιχεί στην (45) έχει την μορφή:

$$\begin{aligned}C_0\dot{\boldsymbol{\alpha}} &= (\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{f_1}) \circ (C_2\boldsymbol{\alpha}) + (\boldsymbol{\gamma} \circ \boldsymbol{f_2}) \circ (C_1\boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{f_3} \circ (C_0\boldsymbol{\alpha}) \\ &\quad + \sum_{\ell=1}^{k} \{(\boldsymbol{\gamma}^{\circ n_\ell} \circ \boldsymbol{g_\ell}) \circ (C_0\boldsymbol{\alpha})^{\circ m_\ell} \circ (C_1\boldsymbol{\alpha})^{\circ n_\ell}\}\end{aligned} \tag{60}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όπου οι $(2N+2)\times(2N+2)$ πίνακες C_m ορίζονται στην (39), τα διανύσματα $\boldsymbol{\gamma}$, $\boldsymbol{f_{1,2,3}}$ και $\boldsymbol{g_\ell}$ ορίζονται από τις σχέσεις:

$$\boldsymbol{\gamma} = [\gamma_1\ \gamma_2\ \gamma_2\ \cdots\ \gamma_N\ \gamma_N\ \gamma_{N+1}]^{\mathsf{T}},$$

$$\boldsymbol{f_i} = \left[\tilde{\boldsymbol{f}}_{\boldsymbol{i_1}}\ \boldsymbol{f_{i_2}}\ \cdots\ \boldsymbol{f_{i_N}}\ \tilde{\boldsymbol{f}}_{\boldsymbol{i_{N+1}}}\right]^{\mathsf{T}} \quad i=1,2,3\ ,$$

$$\boldsymbol{g_\ell} = \left[\tilde{\boldsymbol{g}}_{\boldsymbol{\ell_1}}\ \boldsymbol{g_{\ell_2}}\ \cdots\ \boldsymbol{g_{\ell_N}}\ \tilde{\boldsymbol{g}}_{\boldsymbol{\ell_{N+1}}}\right]^{\mathsf{T}},$$

ενώ τα διανύσματα διάστασης $2N+2$, $\boldsymbol{\alpha}\equiv\boldsymbol{\alpha}(t)$ και $\dot{\boldsymbol{\alpha}}\equiv\dot{\boldsymbol{\alpha}}(t)$ περιγράφονται απο:

$$\boldsymbol{\alpha} = \left[\ \alpha_0(t)\quad \alpha_2(t)\quad \cdots\quad \alpha_{2N+1}(t)\quad \alpha_{2N+2}(t)\ \right]^{\mathsf{T}}$$

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \left[\ \dot{\alpha}_0(t)\quad \dot{\alpha}_2(t)\quad \cdots\quad \dot{\alpha}_{2N+1}(t)\quad \dot{\alpha}_{2N+2}(t)\ \right]^{\mathsf{T}}.$$

Σε αυτό το σημείο, πρέπει να σημειώσουμε ότι ο πίνακας C_0 του συστήματος ΣΔΕ (60) είναι αντιστρέψιμος αφού έχουμε αποδείξει ότι τα γενικευμένα πολυώνυμα Hermite είναι γραμμικά ανεξάρτητα.

2.3 Η dDHC μέθοδος για γενικευμένα μη-γραμμικά παραβολικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, στις 1+2 διαστάσεις

Με ανάλογο, της παραπάνω παραγράφου, τρόπο μπορούμε να περιγράψουμε και την χρήση των δομικών στοιχείων που έχουμε αναπτύξει για την αντιμετώπιση γενικευμένων προβλημάτων στις δύο χωρικές διαστάσεις.

Πιο συγκεκριμένα, σε αντιστοιχία με το γενικό μονοδιάστατο πρόβλημα που περιγράψαμε στην (45), ας θεωρήσουμε το γενικό μη-γραμμικό παραβολικό πρόβλημα δύο χωρικών διαστάσεων

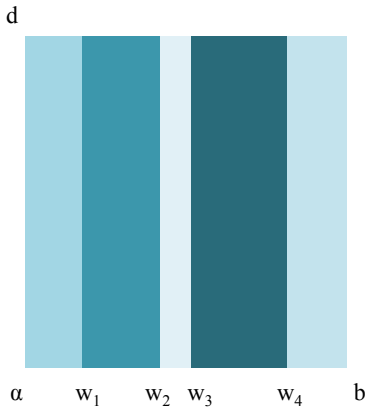
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathcal{L}[c] + \mathcal{N}[c]\ ,\ a<x<b\ ,\ a<y<d\ ,\ t\geq 0$$
$$c(x,y,0) = c_0(x,y)\ \ ,\ \ \frac{\partial c}{\partial \eta}(x,y,t) = 0$$

όπου ο γραμμικός και ο μη γραμμικός τελεστής $\mathcal{L}[\cdot]$ και $\mathcal{N}[\cdot]$ αντίστοιχα, ορίζονται απο:

$$\mathcal{L}[c] = f_1\frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right) + f_2\frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial c}{\partial y}\right) + f_3\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right) + f_4\left(D\frac{\partial c}{\partial y}\right) + f_5\,c\ ,$$
$$\mathcal{N}[c] = q\left(x,t,c,\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right),\left(D\frac{\partial c}{\partial y}\right)\right) = \sum_{\ell=1}^{P} g_\ell c^{m_\ell}\left(D\frac{\partial c}{\partial x}\right)^{n_\ell}\left(D\frac{\partial c}{\partial y}\right)^{k_\ell}\ , \tag{61}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

με $c \equiv c(x,y,t)$ να είναι συνεχής συνάρτηση, οι $f_i \equiv f_i(x,y,t)$ και $g_\ell \equiv g_\ell(x,y,t)$ να είναι επαρκώς ομαλές συναρτήσεις, και m_ℓ, n_ℓ, k_ℓ, P μη αρνητικοί ακέραιοι μεγαλύτεροι του ένα. Τον συντελεστή διάχυσης $D \equiv D(x,y)$ τον θεωρούμε ασυνεχή, με τέτοιο τρόπο ώστε να χαρακτηρίζει προβλήματα πολλαπλών περιοχών τύπου Stripes.



Σχήμα 13: Αντιπροσωπευτική μορφή συντελεστού διάχυσης για προβλήματα τύπου κατακόρυφων λωρίδων (stripes).

Ειδικότερα, ας θεωρήσουμε ότι έχουμε το πρόβλημα των κατακόρυφων Stripes, όπως επιδεικνύουμε στο Σχήμα 13, το οποίο γενικά χαρακτηρίζεται από K γραμμές διεπαφής, κάθετες στον άξονα $x'x$, και $K+1$ χωρία τύπου Stripes. Πιο συγκεκριμένα, αν θεωρήσουμε τις γραμμές διεπαφής

$$x = w_k \ , \ k = 1, \cdots, K \quad \text{όπου} \quad a = w_0 < w_1 < \cdots < w_k < \cdots < w_K < w_{K+1} = b,$$

και ορίσουμε τα χωρία

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) \times (a,d) \ , \quad k = 1, \ldots, K+1 \ . \tag{62}$$

τότε ο συντελεστής διάχυσης ορίζεται ως

$$D(x,y) = \gamma_k \in \mathbb{R} \ \text{ για } \ (x,y) \in \mathcal{W}_k \ , \quad k = 1, \ldots, K+1 \ . \tag{63}$$

Οι συνθήκες συνέχειας που προκύπτουν από την παραβολική φύση της διαφορικής για κάθε γραμμή διεπαφής περιγράφονται, κατ' αντιστοιχία με την μονοδιάστατη περίπτωση, ως :

$$\begin{cases} \lim\limits_{x \to w_k^-} c(x,y,t) & = & \lim\limits_{x \to w_k^+} c(x,y,t) \\ \\ \lim\limits_{x \to w_k^-} D(x,y) c_x(x,y,t) & = & \lim\limits_{x \to w_k^+} D(x,y) c_x(x,y,t) \end{cases} . \tag{64}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Δουλεύοντας τώρα παρόμοια με την προηγούμενη παράγραφο για το μονοδιάστατο πρόβλημα και χρησιμοποιώντας τα Λημμάτα 3 και 5, το collocation σύστημα ΣΔΕ παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} C_{\tilde{0}0}\dot{\boldsymbol{a}} = &(\boldsymbol{\gamma}\circ\boldsymbol{f_1})\circ(C_{\tilde{2}0}\boldsymbol{a}) + (\boldsymbol{\gamma}\circ\boldsymbol{f_2})\circ(C_{\tilde{0}2}\boldsymbol{a}) + (\boldsymbol{\gamma}\circ\boldsymbol{f_3})\circ(C_{\tilde{1}0}\boldsymbol{a}) + \\ &+ (\boldsymbol{\gamma}\circ\boldsymbol{f_4})\circ(C_{\tilde{0}1}\boldsymbol{a}) + \boldsymbol{f_5}\circ(C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}) + \\ &+ \sum_{\ell=1}^{P}(\boldsymbol{\gamma}^{\circ(n_\ell+k_\ell)}\circ\boldsymbol{g_\ell})\circ(C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a})^{\circ m_\ell}\circ(C_{\tilde{1}0}\boldsymbol{a})^{\circ n_\ell}\circ(C_{\tilde{0}1}\boldsymbol{a})^{\circ k_\ell} \end{aligned} \tag{65}$$

όπου οι πίνακες $C_{\tilde{m}n}$ έχουν ορισθεί στην σχέση (42).

Τέλος σημειώνουμε ότι, το σύστημα (65), εύκολα μπορεί να τροποποιηθεί για να περιγράψει το σύστημα ΣΔΕ για το πρόβλημα των οριζόντιων Stripes αν, στη θέση των πινάκων $C_{\tilde{m}n}$, χρησιμοποιήσουμε τους πίνακες $C_{m\tilde{n}}$ που έχουν ορισθεί με την σχέση (43).

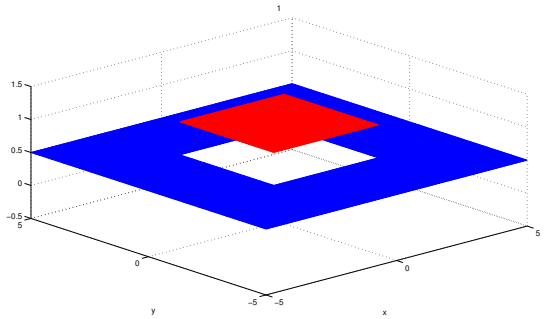
2.4 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με γωνιακές ασυνέχειες

Η εφαρμογή της dDHC σε ΠΑΣΣ-ΠΠ που παρουσιάζουν *γωνιακές ασυνέχειες* έχει ήδη συμπεριληφθεί στην Τεχνική Έκθεση 2014. Εδώ, για λόγους πληρότητας της τελικής έκθεσης, αναφέρουμε εν τάχει τα βασικά συμπεράσματα.

Ας θεωρήσουμε, συνεπώς, το γενικό πρόβλημα πολλαπλών πεδίων, όπως το περιγράψαμε στη σχέση (1), με πεδίο ορισμού το ορθογώνιο $\Omega = [a,b]\times[a,b]$ και με συντελεστή διάχυσης D να ορίζεται από την σχέση

$$D = \begin{cases} 1 & , \quad (x,y)\in\mathcal{W} = (w_1,w_2)\times(w_1,w_2) \\ \gamma & , \quad (x,y)\in\Omega\backslash\mathcal{W} \end{cases}$$

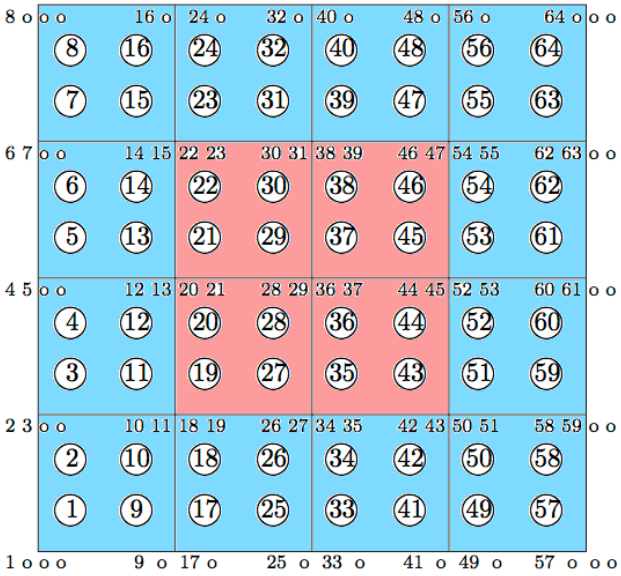
με $a < w_1, w_2 < b$, δημιουργώντας δύο περιοχές με ορθογώνια διεπαφή μεταξύ τους, όπως επιδεικνύεται και στο Σχήμα 14.



Σχήμα 14: Συντελεστής διάχυσης D με γωνιακές ασυνέχειες.

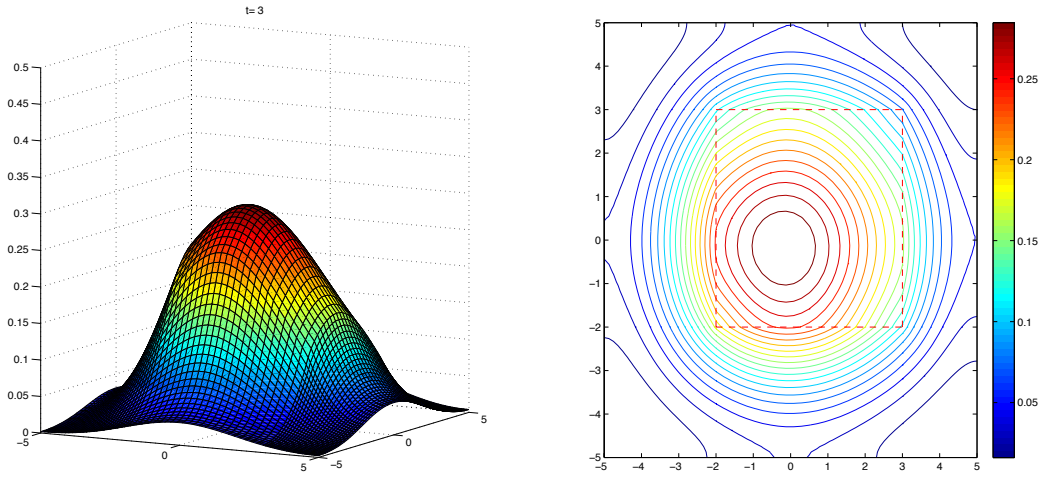
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Για τη κατασκευή του collocation συστήματος ΣΔΕ χρησιμοποιήσαμε την μπλοκ-τριδιαγώνια αρίθμηση αγνώστων και εξισώσεων, όπως χαρακτηριστικά δείχνουμε στο Σχήμα 15 για μία ενδεικτική 4×4 διαμέριση.



Σχήμα 15: Αρίθμηση αγνώστων και εξισώσεων για μία ενδεικτική διαμέριση.

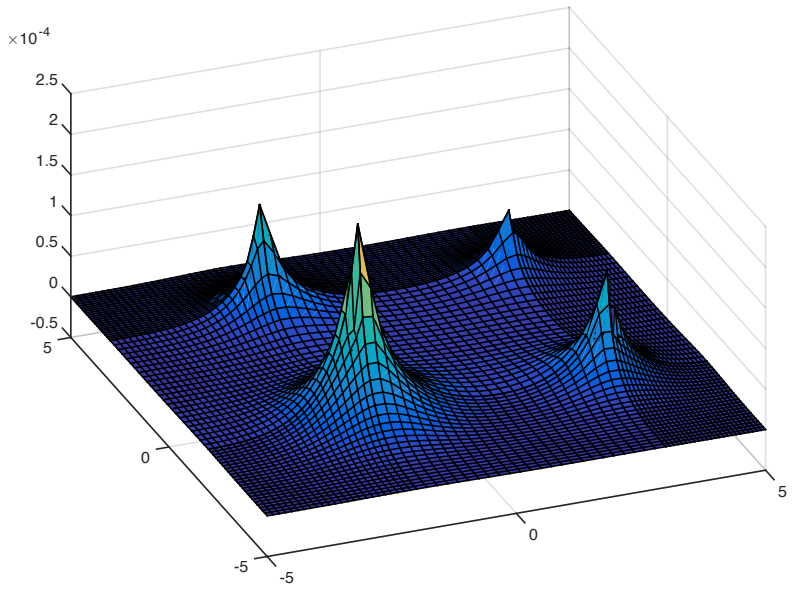
Όπως φαίνεται στο Σχ. 16 η αριθμητική λύση που παρήχθη, για ένα γραμμικό πρόβλημα-μοντέλο, προσεγγίζει το επιθυμητό προφίλ της ασυνέχειας της παραγώγου στο ορθογώνιο διεπαφής.



Σχήμα 16: Η αριθμητική λύση για ένα Rectangular πρόβλημα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Όμως, μετά από σειρά προσομοιώσεων και ανάλυσης, διαπιστώσαμε ότι η μέθοδος δημιουργεί σφάλματα χαμηλότερης τάξης σε γειτονιές των γωνιακών ασυνεχειών (Σχ. 17) με συνέπεια την απώλεια της τέταρτης τάξης σύγκλισης της μεθόδου.



Σχήμα 17: Το απόλυτο χωρικό σφάλμα της λύσης για ένα Rectangular πρόβλημα.

Η ερευνητική προσπάθεια για την επίλυση του προβλήματος της απώλειας της τέταρτης τάξης σύγκλισης συνεχίζεται και αποτελεί έναν από τους μελλοντικούς στόχους μας.

2.5 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Η ανάπτυξη φορμαλισμού για τον συνδυασμό της μεθόδου Collocation με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ) για ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις έχει ήδη συμπεριληφθεί στην Τεχνική Έκθεση 2014. Εδώ, για λόγους πληρότητας της τελικής έκθεσης, αναφέρουμε εν τάχει τα βασικά συμπεράσματα.

Η HC-IR σε αντίθεση με την dDHC δεν λύνει ένα ενιαίο πρόβλημα πολλαπλών πεδίων, αλλά το διαιρεί σε ανεξάρτητα προβλήματα και χρησιμοποιεί τα σημεία διεπαφής για να παράγει τις συνοριακές συνθήκες ανάμεσα σε αυτά. Συνεπώς, για την ανάπτυξη της μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε τα συνεχή πολυώνυμα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Hermite και θεωρήσαμε τις συνθήκες συνέχειας στις διεπαφές ως εσωτερικές συνοριακές συνθήκες των προβλημάτων. Ειδικότερα, η μέθοδος που αναπτύξαμε ανήκει στην κατηγορία two step AVE methods, και μπορούμε να την περιγράψουμε αλγοριθμικά για προβλήματα με δύο περιοχές (όπου ο συντελεστής διάχυσης λαμβάνει τη τιμή $D = \gamma$ στη μία περιοχή και $D = 1$στην άλλη) ως εξής:

1. Για $k = 0, \ldots$
2. Χωρίζουμε το χωρίο μας Ω σε δύο υποχωρία Ω_1, Ω_2 και διαλέγουμε τυχαία αρχικά $u_1^{(0)}, u_2^{(0)}$ για την λύση κάθε υποχωρίου.
3. $g_1 = \beta_1 \left.\frac{du_1^{(2k)}}{dx}\right|_{x=w} + \frac{1-\beta_1}{\gamma} \left.\frac{du_2^{(2k)}}{dx}\right|_{x=w}$, $g_2 = \gamma g_1$
4. Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_1 με $u_x(a,t) = 0,\ u_x(w,t) = g_1$ και
   Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_2 με $u_x(w,t) = g_2,\ u_x(b,t) = 0$
5. $h_1 = \alpha_1\, u_1^{(2k+1)}\Big|_{x=w} + (1-a_1)\, u_2^{(2k+1)}\Big|_{x=w}$, $h_2 = h_1$
6. Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_1 με $u_x(a,t) = 0,\ u(w,t) = h_1$ και
   Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_2 με $u(a,t) = h_2,\ u_x(b,t) = 0$.
7. Κριτήριο Τερματισμού
8. Τέλος Για

Επισημαίνουμε ότι, η ικανοποίηση των συνθηκών διεπαφής (3) επιτυγχάνεται στα βήματα 3 και 6 του αλγόριθμου. Το πρόβλημα στις δύο χωρικές διαστάσεις βρίσκεται σε εξέλιξη.

2.6 IMEX Runge-Kutta και dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ, τύπου stripes, σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης CPU/GPU

Για την επίλυση του collocation συστήματος ΣΔΕ (65), το οποίο αναφέρεται σε μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ τύπου stripes και για τις ανάγκες τις παρούσας παραγράφου παίρνει τη μορφή

$$C_{\tilde{0}0}\dot{\boldsymbol{a}} = \mathcal{L}(\boldsymbol{a}) + \mathcal{N}(\boldsymbol{a}), \tag{66}$$

όπου $\mathcal{L}(\boldsymbol{a})$ συμβολίζει το γραμμικό τμήμα του συστήματος και ορίζεται ως

$$\begin{aligned}\mathcal{L}(\boldsymbol{a}) &\doteq \boldsymbol{\gamma} \circ [\boldsymbol{f_1} \circ C_{\tilde{2}0}\boldsymbol{a} + \boldsymbol{f_2} \circ C_{\tilde{0}2}\boldsymbol{a} + \boldsymbol{f_3} \circ C_{\tilde{1}0}\boldsymbol{a} + \boldsymbol{f_4} \circ C_{\tilde{0}1}\boldsymbol{a}] + \boldsymbol{f_5} \circ C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a} \\ &= [D_\gamma\,(D_1 C_{\tilde{2}0} + D_2 C_{\tilde{0}2} + D_3 C_{\tilde{1}0} + D_4 C_{\tilde{0}1}) + D_5 C_{\tilde{0}0}]\,\boldsymbol{a} \\ &\doteq C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a}\end{aligned} \tag{67}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ενώ $\mathcal{N}(\boldsymbol{a})$ συμβολίζει το μη-γραμμικό τμήμα του συστήματος και ορίζεται ως

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{a}) \doteq \sum_{\ell=1}^{P} (\boldsymbol{\gamma}^{\circ(n_\ell+k_\ell)} \circ \boldsymbol{g_\ell}) \circ (C_{\tilde{0}\tilde{0}}\boldsymbol{a})^{\circ m_\ell} \circ (C_{\tilde{1}\tilde{0}}\boldsymbol{a})^{\circ n_\ell} \circ (C_{\tilde{0}\tilde{1}}\boldsymbol{a})^{\circ k_\ell}, \tag{68}$$

με $D_\gamma = \text{diag}(\gamma)$ και $D_i = \text{diag}(\boldsymbol{f_i})$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, χρησιμοποιήσαμε (βλ. Τεχνικές Εκθέσεις Δράσης 4.2) υψηλής ευστάθειας δευτέρας και τρίτης τάξεως σχήματα χρονικής διακριτοποίησης IMEX Runge-Kutta. Τα σχήματα αυτά συνδυάζουν έμμεσες (implicit) διακριτοποιήσεις για το άκαμπτο (stiff) τμήμα του συστήματος και άμεσες για το λιγότερο άκαμπτο τμήμα του.

Προσαρμόζοντας την λογική των IMEX RK μεθόδων στα προβλήματα ενδιαφέροντος, και προς αποφυγήν επίλυσης μη-γραμμικών αλγεβρικών συστημάτων που θα επιβάρυναν σημαντικά το υπολογιστικό κόστος, χρησιμοποιήσαμε έμμεσα σχήματα για το γραμμικό τμήμα $\mathcal{L}(\boldsymbol{a})$ του συστήματος, το οποίο περιλαμβάνει και τον ασυνεχή συντελεστή διάχυσης, και άμεσα σχήματα για το μη-γραμμικό τμήμα του $\mathcal{N}(\boldsymbol{a})$. Με αυτόν τον τρόπο, ένα από τα σχήματα IMEX RK, τριών σταδίων - δευτέρας τάξεως, που χρησιμοποιήσαμε με επιτυχία περιγράφεται ως εξής:

IMEX-(3,3,2) RK

$$\begin{aligned}
C\boldsymbol{a}_1 &= C_{\tilde{0}\tilde{0}}\boldsymbol{a}^{(n)} \\
C\boldsymbol{a}_2 &= C_{\tilde{0}\tilde{0}}\boldsymbol{a}^{(n)} + \tau\mathcal{N}(\boldsymbol{a}_1) + \tau(1-2\lambda)C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a}_1 \\
C\boldsymbol{a}_3 &= C_{\tilde{0}\tilde{0}}\boldsymbol{a}^{(n)} + \frac{\tau}{4}\left[\mathcal{N}(\boldsymbol{a}_1) + \mathcal{N}(\boldsymbol{a}_2)\right] + \tau(\frac{1}{2}-\lambda)C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a}_1 \\
C_{\tilde{0}\tilde{0}}\boldsymbol{a}^{(n+1)} &= C_{\tilde{0}\tilde{0}}\boldsymbol{a}^{(n)} + \frac{\tau}{6}\left[\mathcal{N}(\boldsymbol{a}_1) + \mathcal{N}(\boldsymbol{a}_2) + 4\mathcal{N}(\boldsymbol{a}_3) + C_{\mathcal{L}}\left(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + 4\boldsymbol{a}_3\right)\right]
\end{aligned}$$

όπου τ συμβολίζει το βήμα της χρονικής διακριτοποίησης (δηλ. $\tau = \Delta t$), ο πίνακας C ορίζεται ως $C \doteq C_{\tilde{0}\tilde{0}} - \lambda\tau C_{\mathcal{L}}$, ενώ η βέλτιστη τιμή της παραμέτρου λ λαμβάνεται για $\lambda = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}$.

Για την ανάδειξη και περιγραφή των πράξεων γραμμικής άλγεβρας που περιλαμβάνονται στην μέθοδο IMEX-(3,3,2) RK ανωτέρω, καθώς και της σειράς εκτέλεσης τους, παραθέτουμε τον αλγόριθμο που ακολουθεί σε μορφή ψευδοκώδικα:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ Ι

Δημιουργία Πινάκων $C_{\tilde{0}0}, C_{\mathcal{L}}, C$ *και* $\boldsymbol{a_{old}}$

for $t = \tau$ **to** t_{max} **με χρονικό βήμα** τ

Υπολογισμός $\boldsymbol{a_0} = C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a_{old}}$

Επίλυση $C\,\boldsymbol{a_1} = \boldsymbol{a_0}$

Υπολογισμός $\boldsymbol{n}_1 = \mathcal{N}(\boldsymbol{a}_1)$ και $\boldsymbol{c}_1 = C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a}_1$

Υπολογισμός $\tilde{\boldsymbol{a}}_0 = \boldsymbol{a_0} + \tau\boldsymbol{n}_1 + \tau(1-2\lambda)\boldsymbol{c}_1$

Επίλυση $C\,\boldsymbol{a_2} = \tilde{\boldsymbol{a}}_0$

Υπολογισμός $\boldsymbol{n}_2 = \mathcal{N}(\boldsymbol{a}_2)$ και $\boldsymbol{c}_2 = C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a}_2$

Υπολογισμός $\tilde{\boldsymbol{a}}_0 = \boldsymbol{a_0} + \frac{\tau}{4}(\boldsymbol{n}_1+\boldsymbol{n}_2) + \tau(\frac{1}{2}-\lambda)\boldsymbol{c}_1$

Επίλυση $C\,\boldsymbol{a_3} = \tilde{\boldsymbol{a}}_0$

Υπολογισμός $\boldsymbol{n}_3 = \mathcal{N}(\boldsymbol{a}_3)$ και $\boldsymbol{c}_3 = C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a}_3$

Υπολογισμός $\tilde{\boldsymbol{a}}_0 = \boldsymbol{a_0} + \frac{\tau}{6}(\boldsymbol{n}_1+\boldsymbol{n}_2+4\boldsymbol{n}_3+\boldsymbol{c}_1+\boldsymbol{c}_2+4\boldsymbol{c}_3)$

Επίλυση $C_{\tilde{0}0}\,\boldsymbol{a_{new}} = \tilde{\boldsymbol{a}}_0$

Υπολογισμός $\boldsymbol{a_{old}} = \boldsymbol{a_{new}}$

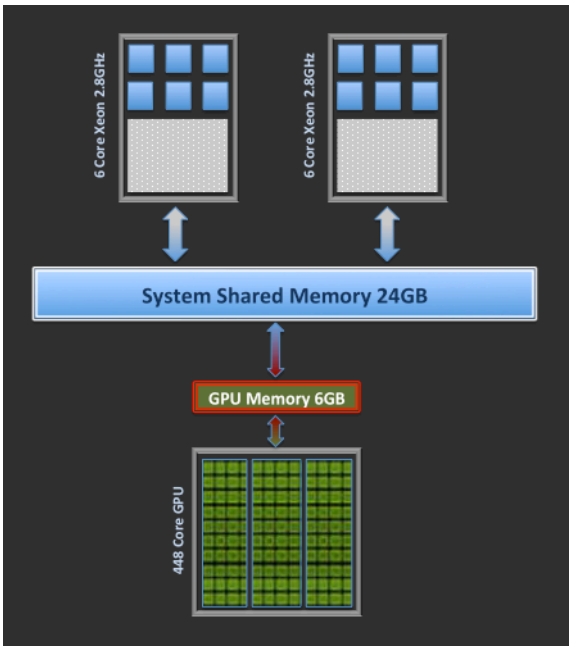
endfor

Για την απεικόνιση του ανωτέρω αλγορίθμου σε υπολογιστικές αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης που διαθέτουν και γραφικούς επιταχυντές (GPUs), όπως επιδεικνύεται και στο Σχήμα 18, χρησιμοποιούμε σχετικά ερευνητικά αποτελέσματα, που έχουμε ήδη παρουσιάσει στις Τεχνικές Εκθέσεις των Δράσεων 2.1 και 4.2 αλλά και σε σχετικές δημοσιεύσεις, ώστε να επιταχύνουμε την υπολογιστική διαδικασία σε πρώτο επίπεδο, δηλαδή χωρίς να ληφθεί υπόψη η δομή του πινάκων που συμμετέχουν στον αλγόριθμο. Η ερευνητική διαδικασία για την ανάπτυξη αλγορίθμων που εκμεταλλεύονται την δομή των collocation πινάκων βρίσκεται σε εξέλιξη και αποτελεί έναν από τους μελλοντικούς ερευνητικούς στόχους.

Συνεπώς, οι βασικές αρχές που διέπουν τον προς κατασκευή παράλληλο αλγόριθμο περιγράφονται ως εξής:

- Για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων χρησιμοποιείται η προρυθμισμένη BiCGSTAB επαναληπτική μέθοδος. Ως προρυθμιστής χρησιμοποιείται η ατελής διάσπαση iLU.
- Όλοι οι πίνακες αποθηκεύονται σε αραιή μορφή.
- Όλες οι πράξεις γραμμικής άλγεβρας (BLAS) εκτελούνται στην GPU.
- Η διάσπαση των πινάκων C και $C_{\tilde{0}0}$ καθώς και οι εμπρός/πίσω αντικαταστάσεις για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων εκτελούνται στις CPUs.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 18: Αρχιτεκτονική κοινής μνήμης υπολογιστικού συστήματος CPU-GPU

Με βάση τις ανωτέρω αρχές ο αλγόριθμος παίρνει τη μορφή:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΙΙ

Δημιουργία Πινάκων $C_{\tilde{0}0}, C_{\mathcal{L}}, C,\ \mathrm{i}LU(C),\ \mathrm{i}LU(C_{\mathcal{L}})$ *και* $\boldsymbol{a_{old}}$ στη CPU

for $t = \tau$ **to** t_{max} **με χρονικό βήμα** τ

Υπολογισμός σε GPU $\quad \boldsymbol{a_0} = C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a_{old}}$

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $\quad C\,\boldsymbol{a_1} = \boldsymbol{a_0}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \boldsymbol{n_1} = \mathcal{N}(\boldsymbol{a_1})$ και $\boldsymbol{c_1} = C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a_1}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{a_0} + \tau\boldsymbol{n_1} + \tau(1-2\lambda)\boldsymbol{c_1}$

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $\quad C\,\boldsymbol{a_2} = \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \boldsymbol{n_2} = \mathcal{N}(\boldsymbol{a_2})$ και $\boldsymbol{c_2} = C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a_2}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{a_0} + \frac{\tau}{4}(\boldsymbol{n_1}+\boldsymbol{n_2}) + \tau(\frac{1}{2}-\lambda)\boldsymbol{c_1}$

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $\quad C\,\boldsymbol{a_3} = \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \boldsymbol{n_3} = \mathcal{N}(\boldsymbol{a_3})$ και $\boldsymbol{c_3} = C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a_3}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{a_0} + \frac{\tau}{6}(\boldsymbol{n_1}+\boldsymbol{n_2}+4\boldsymbol{n_3}+\boldsymbol{c_1}+\boldsymbol{c_2}+4\boldsymbol{c_3})$

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $\quad C_{\tilde{0}0}\,\boldsymbol{a_{new}} = \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}}$

Υπολογισμός σε GPU $\quad \boldsymbol{a_{old}} = \boldsymbol{a_{new}}$

endfor

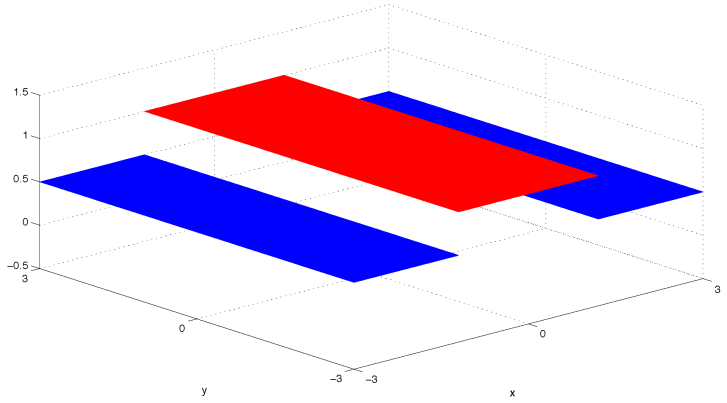
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3 Αποτελέσματα

Το πρόβλημα μοντέλο διάχυσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου που θεωρούμε στην παράγραφο αυτή έχει τη μορφή

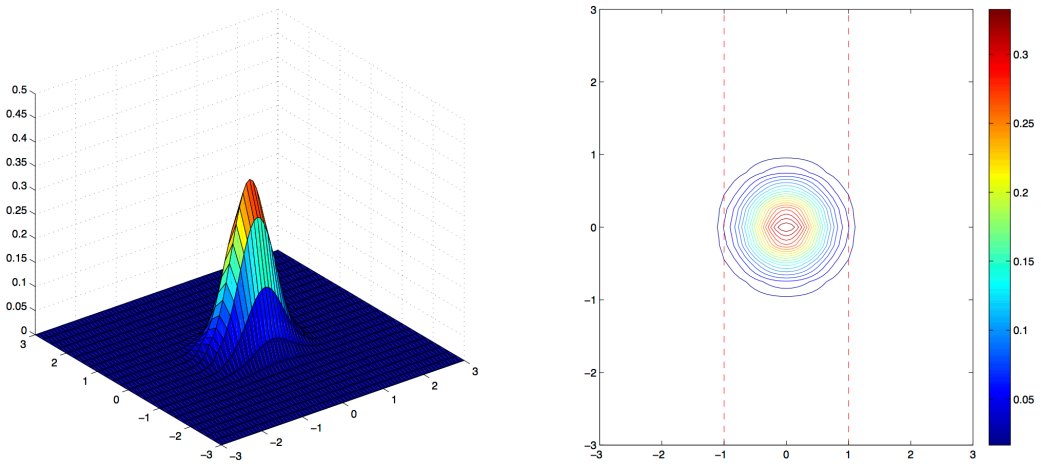
$$c_t = \nabla \cdot (D\nabla c) + c - c^2, \quad (x, y) \in (-3, 3) \times (-3, 3)$$

με τον συντελεστή διάχυσης D να είναι ασυνεχής κατά μήκος των γραμμών $x = -1$ και $x = 1$ όπως δείχνουμε και στο σχήμα που ακολουθεί.



Σημειώνουμε ότι για το ανωτέρω πρόβλημα μοντέλο οι τελεστές $\mathcal{L}(\boldsymbol{a})$ και $\mathcal{N}(\boldsymbol{a})$, που ορίστηκαν στις σχέσεις (67)-(68), παίρνουν αντίστοιχα την μορφή:

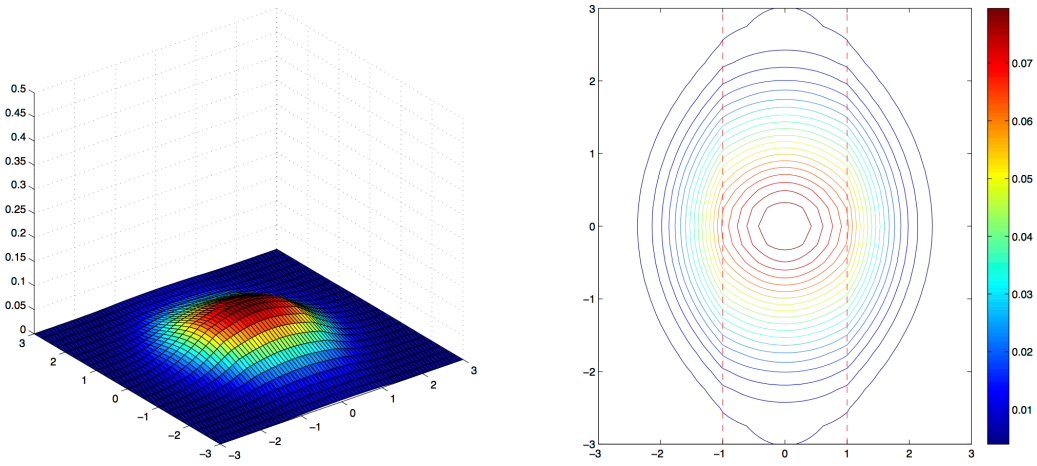
$$\mathcal{L}(\boldsymbol{a}) \equiv C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a} = \left[D_\gamma \left(C_{\tilde{2}0} + C_{\tilde{0}2}\right) + C_{\tilde{0}0}\right]\boldsymbol{a} \quad \text{και} \quad \mathcal{N}(\boldsymbol{a}) = -\left(C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}\right) \circ \left(C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}\right).$$



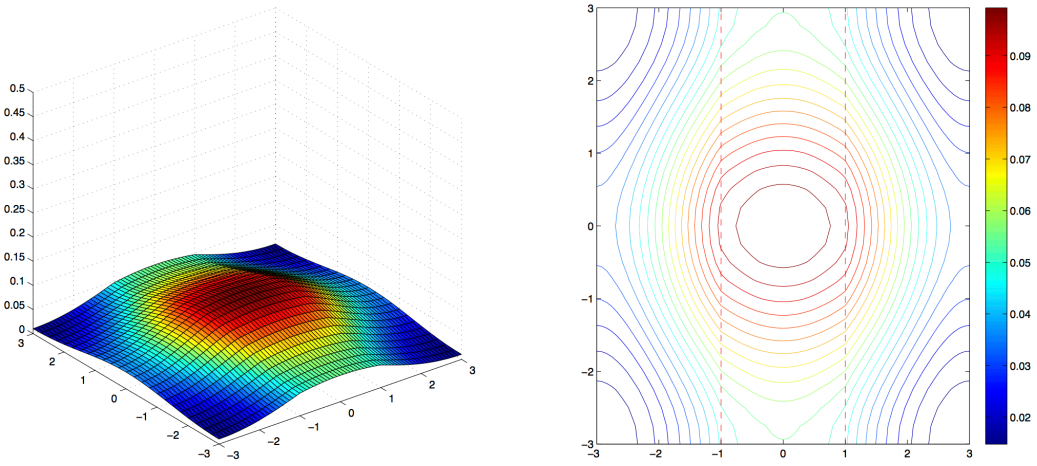
Σχήμα 19: Συγκέντρωση κυττάρων $c(x, y, t)$ κατά την 5η ημέρα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στα σχήματα 19- 23 συνοψίζονται τα αποτελέσματα, από την εκτέλεση του Αλγορίθμου Ι της προηγούμενης παραγράφου, που αφορούν στη εξέλιξη στο χρόνο της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων αλλά και στη συμπεριφορά της dDHC μεθόδου.

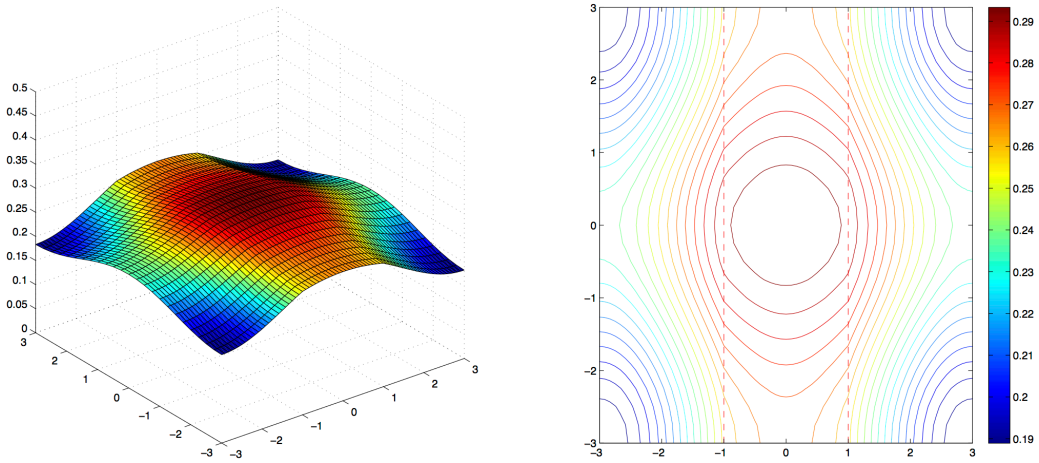


Σχήμα 20: Συγκέντρωση κυττάρων $c(x, y, t)$ κατά την 50η ημέρα

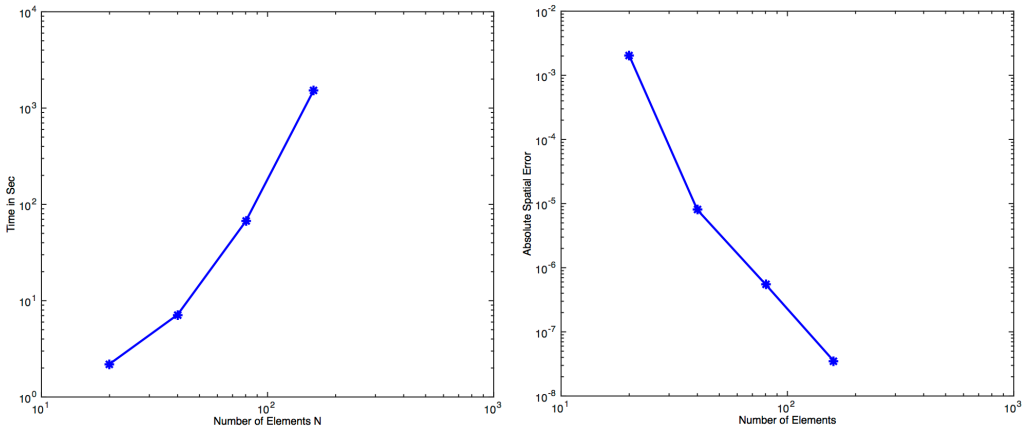


Σχήμα 21: Συγκέντρωση κυττάρων $c(x, y, t)$ κατά την 150η ημέρα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 22: Συγκέντρωση κυττάρων $c(x, y, t)$ κατά την 300η ημέρα



Σχήμα 23: Χρόνος εκτέλεσης και τάξη σύγκλισης της dDHC μεθόδου

Η υλοποίηση του παράλληλου Αλγορίθμου ΙΙ πραγματοποιήθηκε σε μηχάνημα τύπου HP SL390s το οποίο διαθέτει δύο επεξεργαστές των 6 πυρήνων τύπου Xeon@2.8 GHz και 24 GB συνολικής μνήμης, καθώς και ένα γραφικό υποσύστημα NVIDIA Tesla M2070 επιτάχυνσης υπολογισμών, το οποίο επικοινωνεί με το μηχάνημα μέσω PCI-e Gen2. Το μηχάνημα χρησιμοποιεί το λειτουργικό σύστημα Oracle Linux 6.3 x64. Οι υλοποιήσεις πραγματοποιήθηκαν με χρήση πολλαπλών νημάτων εκτέλεσης στον κεντρικό επεξεργαστή και στον επιταχυντή υπολογισμών με χρήση του μεταγλωττιστή PGI στην έκδοση 15.10 για την γλώσσα προγραμματισμού Cuda Fortran και τα πρότυπα OpenMP και OpenACC. Επίσης χρησιμοποιήθηκαν οι βιβλιοθήκες cuBLAS και cuSPARSE από το πακέτο λογισμικού CUDA toolkit 7.0 για τη διενέργεια υπολογισμών γραμμικής άλγεβρας στο υποσύστημα επιτάχυνσης υπολογισμών, καθώς και η βι-

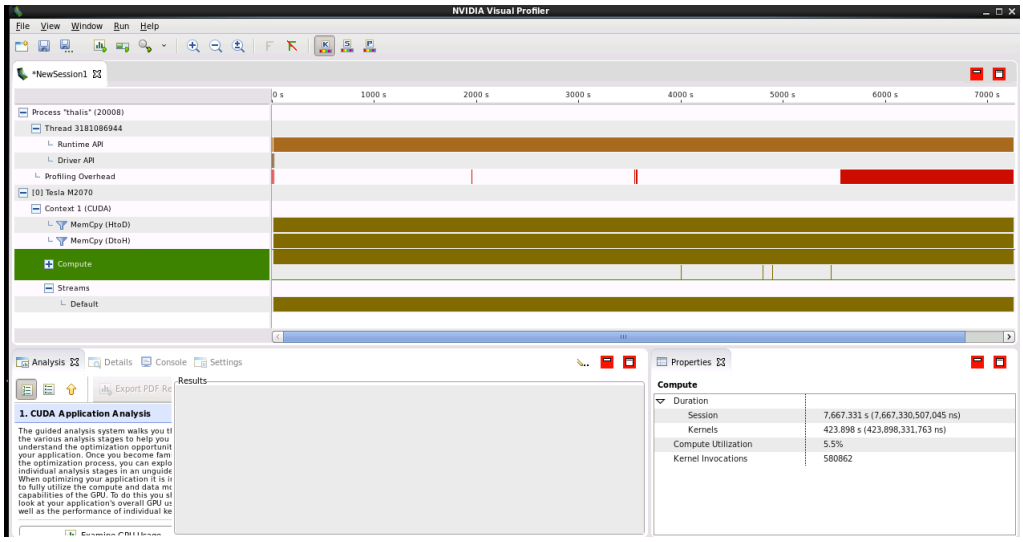
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

βλιοθήκη SPARSEKIT για τη διενέργεια αντίστοιχων υπολογισμών στον κεντρικό επεξεργαστή.

Ο πίνακας που ακολουθεί παρουσιάζει την επιτάχυνση η οποία επετεύχθη, συγκρίνοντας την επίλυση προβλήματος για την υλοποίηση με ένα νήμα εκτέλεσης σε σχέση με εκτελέσεις με χρήση πολλαπλών νημάτων του κεντρικού επεξεργαστή, καθώς και με την υλοποίηση με χρήση του επιταχυντή για πλήθος 40, 80, 160, 320 και 640 πεπερασμένων στοιχείων ανά κατεύθυνση διακριτοποίησης. Οι συνολικοί βαθμοί $dofs$ ελευθερίας εμφανίζονται επίσης για κάθε μεγεθος προβλήματος,

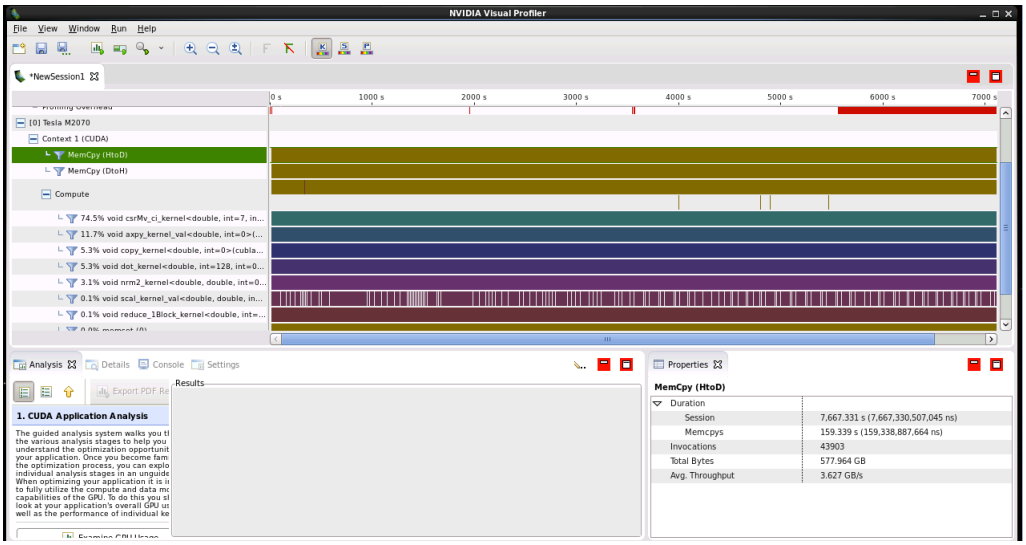
n	$dofs$	CPU1-CPU2	CPU1-CPU4	CPU1-CPU8	CPU-GPU
40x40	6400	1.18	1.36	2.18	1.08
80x80	25600	1.13	1.19	1.21	1.19
160x160	102400	1.01	1.08	1.05	1.13
320x320	409600	1.01	-	-	1.04
640x640	1638400	1.11	1.13	1.09	1.32

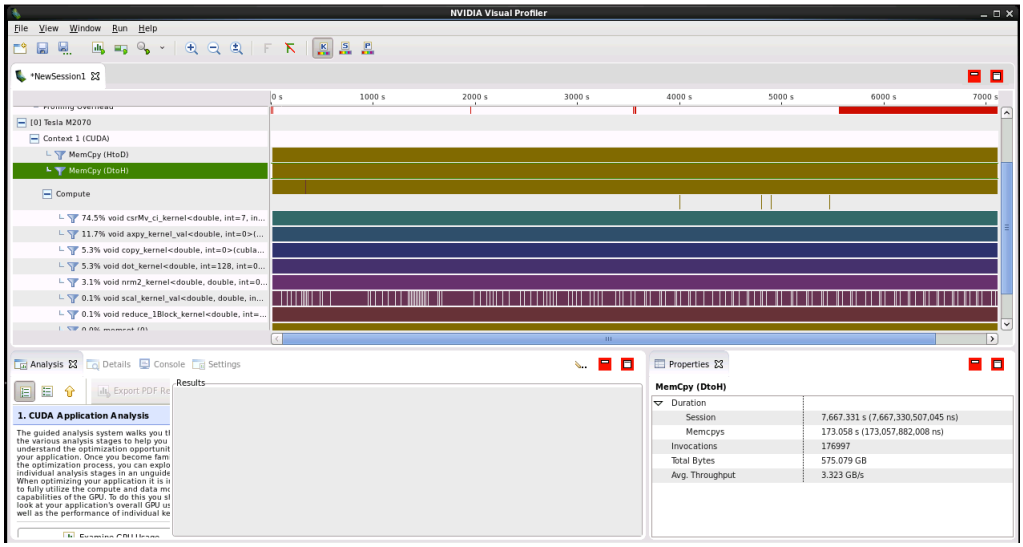
Για τη μεγαλύτερη διάσταση προβλήματος έγινε γραφική ανάλυση της επίδοσης της εφαρμογής κάνοντας χρήση του λογισμικού NVIDIA Visual Profiler, μέσω του οποίου είναι δυνατή η χρονομέτρηση συγκεκριμένων διαδικασιών κατά την εκτέλεση τους στον επιταχυντή. Η παρακάτω εικόνα εμφανίζει τον συνολικό χρόνο εκτέλεσης διαδικασιών στη συσκευή επιτάχυνσης υπολογισμών. Έτσι από τα συνολικά 7667 δευτερόλεπτα εκτέλεσης της εφαρμογής, τα 424 εκτελέστηκαν σε υπολογιστικούς πυρήνες της κάρτας γραφικών και τα υπόλοιπα σε πυρήνες του κεντρικού επεξεργαστή.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Οι δυο επόμενες εικόνες εμφανίζουν το συνολικό μέγεθος των δεδομένων τα οποία μεταφέρθηκαν μεταξύ των μνημών επιταχυντή και υπολογιστικού συστήματος. Έτσι προς την τοπική μνήμη της κάρτας γραφικών μεταφέρθηκαν συνολικά 558GB σε 160 δευτερόλεπτα, ενώ αντίστροφα μετακινήθηκαν δεδομένα μεγέθους 575GB σε 173 δευτερόλεπτα.

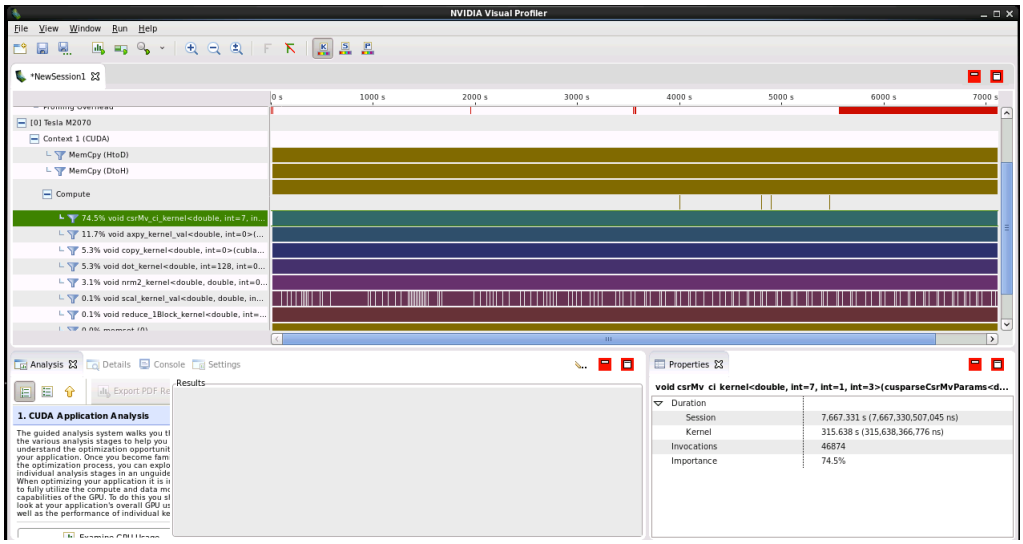




Η επόμενη εικόνα μας εμφανίζει το ποσοστό συμμετοχής κάθε διαδικασίας η οποία εκτελέστηκε στην κάρτα γραφικών. Όπως προκύπτει η διαδικασία πολλαπλασιασμού πίνακα σε αραιή μορφή αποθήκευσης με διάνυσμα κατανάλωσε το 74.5 επί τοις εκατό του χρόνου εκτέλεσης στον επιταχυντή. Ακολουθεί με 12 τοις εκατό περίπου η διαδικασία πολλαπλασιασμού αριθμού με διάνυσμα και πρόσθεσης σε ένα άλλο διάνυσμα, οι διασικασίες αντιγραφής διανυσμάτων και

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

υπολογισμός εδωτερικών γινομένων τους με 5 τοις εκατό, ενώ με 3 τοις εκατό συμμετοχή είναι η διαδικασία υπολογισμού της νόρμας 2 διανύσματος.



Γίνεται σαφές από τα ανωτέρω αποτελέσματα ότι η σειριακή διαδικασία επίλυσης μεγάλων συστημάτων, έστω και αν αποθηκεύονται σε αραιή μορφή, δεν επιτρέπει την μέγιστη απόδοση της παράλληλης υποδομής. Μελλοντικός στόχος της ομάδας είναι η διερεύνηση της δομής των πινάκων που εμπλέκονται στη διαδικασία και η δημιουργία πρόσθετων επιπέδων παραλληλοποίησης για την αποδοτική παράλληλη επίλυση των γραμμικών συστημάτων.

4 Παραδοτέα - Συνεργασίες

- Τρεις ετήσιες (2012, 2013, 2014) και μία τελική (2015) Τεχνικές Εκθέσεις
- Πέντε (5) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων (εκ των οποίων δύο έχουν λάβει βραβείο καλύτερης δημοσίευσης) με κριτές:

  1. IE Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013, Vol I, pp 241-246, WCE-ICAEM 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.
  2. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and IMEX Runge-Kutta for a Treated Quasi-linear Heterogeneous Brain Tumor Model, Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 183-188, 2015

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3. EN Mathioudakis, ND Vilanakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Parallel Iterative Solution of the Hermite Collocation Equations on GPUs, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol II, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K. (Best Paper Award)
4. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015, Vol I, pp. 137-142, WCE-ICAEM 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)
5. N. Vilanakis and E. Mathioudakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs II, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012097

- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.

Για τα ερευνητικά αποτελέσματα που παρουσιάσαμε συνεργάστηκαν τα μέλη της ερευνητικής ομάδας του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1-ΟΕΣ1): καθ. Ι. Σαριδάκης, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, επ. καθ. Ε. Μαθιουδάκης, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη καθώς και οι υποψήφιοι διδάκτορες Π. Στρατής και Ι. Αθανασάκης. Για την ανάπτυξη των μεθόδων χαλάρωσης στις διεπαφές αναπτύχθηκε συνεργασία με μέλη της ΚΕΟ2 του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.

Αναφορές

[1] Akrivis G *Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations*, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012

[2] R. Alexander ”Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE’s”, *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.

[3] I. E. Athanasakis, E. P. Papadopoulou and Y. G. Saridakis, *Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation*, Journal of Physics: Conference Series, 490, 012133, 2014.

[4] I.E. Athanasakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation*, Procs WCE-ICAEM 2015, pp. 137-142, London, U.K.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[5] I.E. Athanasakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Discontinuous Hermite Collocation and IMEX Runge-Kutta for a Treated Quasi-linear Heterogeneous Brain Tumor Model*, Procs INASE-PMAMCM 2015, Recent Advances in Mathematics, pp. 183-188, Zakynthos, Greece

[6] C. de Boor and B. Swartz ”Collocation at Gaussian points”, *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.

[7] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. “The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas”, *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology* , vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.

[8] J.C. Butcher ”Implicit Runge-Kutta processes”, *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.

[9] J.C.Butcher ”The numerical analysis of ordinary differential equations ,” *John Wiley* , 1987.

[10] Cherniha R and Dutka V *Exact and Numerical Solutions of the Generalized Fisher Equation*, Reports on Mathematical Physics, **47**, 393-412, 2001

[11] M. Crouzeix ”Sur l’approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par desmethodes de Runge Kutta”, *PhD Thesis*, University Paris VI, Paris, 1975.

[12] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. ”The modeling of diffusive tumours,” *Journal of Biological Systems* , vol.3, pp.937-945, 1995.

[13] de Boor C and Swartz B *Collocation at Gaussian points*, SIAM Num. Anal., vol. 10, pp. 582-606, 1973

[14] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006

[15] Fisher RA *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugen., **7**, 255-369, 1937

[16] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001

[17] Gottlieb S and Shu CW *Total variation diminishing Runge-Kutta schemes*, Mat. Comp., **67**, 73-85, 1998

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[18] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS *Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem*, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., **1(6)**, 1-25, 1937

[19] Hairer E *Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations*, Numer. Math., **35**, 57-68, 1980

[20] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989

[21] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations, " *John Willey & Sons*, 1980.

[22] Murray JD *Mathematical Biology*, Springer, Berlin, 1989

[23] M.G. Papadomanolaki "The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations", *PhD Thesis*, Technical University of Crete, 2012 (in Greek)

[24] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010

[25] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002

[26] Schmitt B *Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations*, BIT, **28**, 884-897, 1988

[27] Shu CW *Total-variation-diminishing time discretizations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **9**, 1073-1084, 1988

[28] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988

[29] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.

[30] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.

[31] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[32] K.R.Swanson,C.Bridge,J.D.Murray and E.C.Alvord Jr " Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.

[33] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.

[34] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr."A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection," *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Β΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED - MIS 379416)

Δράση 2.2

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **3**

2 Μεθοδολογία **3**
2.1 Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων 3
2.2 Μεθόδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα 6
2.3 Έλεγχος και επαλύθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη κανονικά πεδία 9
2.4 Παράλληλοι Αλγόιθμοι ΜΧΔ 10
2.5 Έλεγχος και επαλήθευση αλγορίθμων με ασύγχρονη συμπεριφορά σε ελλειπτικά προβλήματα 11

3 Αποτελέσματα **12**
3.1 Μεθόδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για σύνθετα προβλήματα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων 12
3.2 Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ 15
3.3 Έλεγχος και επαλήθευση αλγορίθμων με ασύγχρονη συμπεριφορά 17
3.4 Έλεγχος και επαλήθευση των ΜΧΔ σε προβλήματα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου. 18

4 Παραδοτέα **25**

5 Συνεργασίες **26**

6 Μελλοντικές Δράσεις **26**

7 Βιβλιογραφία **27**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Στη Δράση 2.2 (*Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ*) κύριο σκοπό αποτελεί η δημιουργία και μελέτη νέων προχωρημένων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή κατάλληλες για προβλήματα με σύνθετες ΜΔΕ και ιδιαίτερα κατάλληλες για την αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές τους. Συγκεκριμένα, η δράση υλοποιεί τους εξής επιμέρους στόχους: (i) ανασκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων, (ii) ανασκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα, (iii) έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μηκανονικά πεδία, (iv) έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων με ασύγχρονη συμπεριφορά και (v) έλεγχο και επαλήθευση των ΜΧΔ σε προβλήματα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου. Οι αλγόριθμοι υλοποιήθηκαν σε δυο διαφορετικά περιβάλλοντα, σε Matlab και σε FENICS. Η δεύτερη περίπτωση περιγράφεται αναλυτικά στα υποέργα 3 και 4.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα αποτελέσματα.

2 Μεθοδολογία

2.1 Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων

Η προσομοίωση φαινομένων που περιγράφονται με πολλαπλά φυσικά μοντέλα σε πολλαπλά χωρία, είναι μια ερευνητική περιοχή η οποία ελκύει το ενδιαφέρον των επιστημόνων από πολλές και διαφορετικές περιοχές τόσο στο παρελθόν [17] αλλά και σήμερα [11]. Η υπολογιστική ισχύς αυξάνεται και προσφέρεται σε όλα τα επιπεδα του υλικού του υπολογιστή, από πολυ-επεξεργαστές υψηλών επιδόσεων (high speed multi-processors) και συστοιχίες υπολογιστών (clusters) εως πολυπύρηνες κάρτες γραφικών (multi-core GPUs). Το γεγονός αυτό κάνει δυνατή την ακριβή προσομοίωση πραγματικών φαινομένων σε αποδεκτούς χρόνους εκτέλεσης, Επίσης η πληθώρα υπολογιστικών περιβαλλόντων [7, 19, 4, 15, 9, 16, 5, 26] επιτρέπει την καλύτερη δυνατή αξιοποίηση των διαθέσιμων δυνατοτήτων του υλικού (hardware) και του λογισμικού (software). Αυτό μας φέρνει ένα βήμα πιο κοντά στην προσομοίωση προβλημάτων του πραγματικού κόσμου με αποτελεσματικότητα και ακρίβεια.

Ένα πρόβλημα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων είναι

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

πρόβλημα που αποτελείται από πολλαπλά επιμέρους προβλήματα, τα οποία συνήθως διέπονται από διαφορετικούς νόμους και αρχές. Για παράδειγμα νόμους διατήρησης ή καταστατικούς νόμους και αρχές ισορροπίας ή εξέλιξης. Οι συνιστώσες ενός τέτοιου προβλήματος πολλαπλών φυσικών/χωρίων, συχνά ονομάζονται υποπροβλήματα ή επιμέρους προβλήματα του αρχικού-συνολικού προβλήματος, και συνδέονται μεταξύ τους μέσα από συστήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ) σε κοινά ή/και επικαλυπτόμενα χωρία ή μέσω συνοριακών συνθηκών πάνω στις διεπαφές (κοινά σύνορα) μεταξύ των γειτονικών επιμέρους χωρίων/πεδίων.
Στην πρώτη κατηγορία θα μπορούσαμε να εντοπίσουμε προβλήματα που αφορούν την ηλεκτρική ενέργεια και το μαγνητισμό με υδροδυναμική, ενώ η δεύτερη κατηγορία περιλαμβάνει multiphysics προβλήματα όπως fluid-structure dynamics (aeroelasticity) ή δυναμική των ωκεανών-ατμόσφαιρας (γεωφυσική) [11] κλπ.
Όλα τα προβλήματα πολλαπλών φυσικών και χωρίων ορίζονται μέσα από αλγεβρικές μορφές, πριν διακριτοποιηθούν για να επιλυθούν με οποιαδήποτε κατάλληλη μέθοδο. Οι δύο πιο συνήθεις [11] αλγεβρικές μορφές είναι: (i) το συζευγμένο πρόβλημα ισορροπίας (coupled equilibrium problem - (1))

$$F(u) \equiv \begin{pmatrix} F_1(u_1,u_2) \\ F_2(u_1,u_2) \end{pmatrix} = 0, \tag{1}$$

και (ii) το συζευγμένο πρόβλημα εξέλιξης (coupled evolution problem - (2))

$$\begin{aligned} \partial_t u_1 &= f_1(u_1,u_2) \\ \partial_t u_2 &= f_2(u_1,u_2) \end{aligned} . \tag{2}$$

Θέτοντας $J = \frac{\partial(F_1,F_2)}{\partial(u_1,u_2)}$ και $u = (u_1,u_2)^T$, οι αλγόριθμοι αντιμετώπισης προβλημάτων ισορροπίας (1) μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε 3 ομάδες όπως αυτές καταγράφονται στον Πίνακα 1. Συγκεκριμένα υπάρχουν οι μεθοδολογίες Jacobi, Gauss-Seidel και Newton. Υποθέτοντας ότι το αρχικό πρόβλημα αποτελείται από δύο επιμέρους προβλήματα τότε οι αλγόριθμοι σημειώνονται ως εξής:

Jacobi	Gauss-Seidel	Newton
Ορισμός αρχικής τιμής (u_1^0, u_2^0)		
Για k=1,2,... (εως ότου παρατηρηθεί σύγκλιση)		
Υπολόγισε τις (u_1^{k+1}, u_2^{k+1})	Υπολόγισε τις (u_1^{k+1}, u_2^{k+1})	Υπολόγισε το δu
$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$	$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$	$J(u^k)\delta u = -F(u^k)$
$F_2(u_1^k, u_2^{k+1}) = 0$	$F_2(u_1^{k+1}, u_2^{k+1}) = 0$	Υπολόγισε $u^{k+1} = u^k + \delta u$
Τέλος βήματος επαναληπτικής διαδικασίας		

Πίνακας 1: Κατηγορίες αλγορίθμων για προβλήματα ισορροπίας.

Παρατηρούμε ότι στην αριστερή κλάση των αλγορίθμων η εκτέλεση ακολουθεί την μεθοδολογία Jacobi για την επίλυση συστήματος γραμμικών εξισώσεων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Για παράδειγμα στην k επανάληψη, η νέα λύση στο πρώτο χωρίο u_1^{k+1} υπολογίζεται με βάση την προηγούμενη λύση από το γειτονικό χωρίο u_2^k, ενώ η νέα λύση στο δεύτερο χωρίο u_2^{k+1} υπολογίζεται με βάση την προηγούμενη λύση από το πρώτο χωρίο u_1^k. Η διαδικασία αυτή μπορεί να επεκταθεί για περισσότερα από δύο υποχωρία, όπου κάθε φορά η νέα λύση u_i^{k+1} στο i χωρίο υπολογίζεται χρησιμοποιώντας πληροφορία από τη λύση όλων των γειτονικών χωρίων στην προηγούμενη επανάληψη k. Το συγκεκριμένο σχήμα είναι πλήρως παραλληλίσιμο, αφού χρησιμοποιώντας τις λύσεις των επιμέρους προβλημάτων από την προηγούμενη επανάληψη, μπορούμε να υπολογίσουμε τις νέες λύσεις σε όλα τα χωρία ταυτόχρονα.
Οι μέθοδοι τύπου Gauss-Seidel, ακολουθούν το πρότυπο της αντίστοιχης μεθόδου για την επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων. Υποθέτοντας ότι έχουμε n επιμέρους συζευγμένα προβλήματα, η νέα λύση u_i^{k+1} στο i χωρίο υπολογίζεται λαμβάνοντας υπόψιν όλες τις $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}, \ldots, u_{i-1}^{k+1}$ από την τρέχουσα επανάληψη και τις $u_{i+1}^k, \ldots, u_n^k$ από την προηγούμενη επανάληψη. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία δεν έχει χαρακτηριστικά παραλληλισμού, ωστόσο λόγω της άμεσης χρήσης των διορθωμένων τιμών των γειτόνων συγκλίνει ταχύτερα της Jacobi.
Τέλος, οι αλγόριθμοι τύπου Newton, θεωρούνται αυστηρά συζευγμένα σχήματα καθώς εμπλέκουν τις $\frac{\partial F_i}{\partial u_j}$ στον Ιακωβιανό πίνακα του συστήματος και χρησιμοποιούνται τόσο σε προβλήματα ισορροπίας όσο και σε προβλήματα εξέλιξης.

Ορισμός αρχικής συνθήκης $(u_1(t_0), u_2(t_0))$
Για $n = 1, \ldots, N_t$
Προχωρούμε ένα βήμα στο χρόνο για την u_1 λύνοντας την $\partial_t u_1 = f_1(u_1, u_2(t_{n-1}))$ στο n χρονικό σημείο (δηλ., $u_1(t_n)$)
Προχωρούμε ένα βήμα στο χρόνο για την u_2 λύνοντας την $\partial_t u_2 = f_2(u_1(t_n), u_2)$ στο n χρονικό σημείο (δηλ., $u_2(t_n)$)
Τέλος βήματος επαναληπτικής διαδικασίας

Πίνακας 2: Αλγόριθμοι για προβλήματα εξέλιξης.

Για τα προβλήματα εξέλιξης σε πολλαπλά χωρία και φυσικά μοντέλα, θεωρούμε σχήματα όπως αυτό του Πίνακα 2. Η μεθοδολογία αυτή είναι η απλούστερη δυνατή για την επίλυση παραβολικών προβλημάτων πολλαπλών χωρίων και πολλαπλών φυσικών μοντέλων. Κάθε επιμέρους πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπιστεί με άμεσα ή έμμεσα σχήματα για τη διακριτοποίηση ως προς το χρόνο. Σε κάθε βήμα στο χρόνο χρησιμοποιούμε εμφωλευμένη επαναληπτική διαδικασία για βελτίωση της λύσης στο steady πρόβλημα της συγκεκριμένης χρονικής στιγμής.

Οι μέθοδοι διαχωρισμού του χωρίου [10, 13, 14, 6, 18, 20, 8] είναι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν αρχικά για να αντιμετωπίσουν τέτοιου είδους προβλήματα. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι ότι διακριτοποιείται το αρχικό σύν-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

θετο πρόβλημα (ακόμη και αν είναι ήδη χωρισμένο από τη φυσική του) και στη συνέχεια κόβεται σε επιμέρους προβλήματα σε επίπεδο γραμμικής άλγεβρας. Πλήθος μεθόδων, κυρίως επαναληπτικές χρησιμοποιούνται για να επιλύσουν τα επιμέρους γραμμικά συστήματα που προκύπτουν τα οποία είναι ισχυρά συζευγμένα.

Οι Μέθοδοι Χαλάρωσης στη Διεπαφή (ΜΧΔ) [21] αποτελούν μια εναλλακτική μεθοδολογία για την αντιμετώπιση σύνθετων προβλημάτων και περιγράφονται στην παράγραφο 2.2

2.2 Μεθόδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα

Οι ΜΧΔ μελετούν σύνθετα προβλήματα ΜΔΕ πολλαπλών μοντέλων φυσικής και πολλαπλών χωρίων με κύριο χαρακτηριστικό τα επιμέρους προβλήματα να ορίζονται σε ένα απλό χωρίο στο οποίο εφαρμόζεται μια ΜΔΕ. Επίσης, μελετούν το σύνθετο πρόβλημα, ερμηνεύοντας τη φυσική του προκειμένου να κατανοήσουμε και να αξιοποιήσουμε όλες τις ιδιότητές του. Το επιμέρους προβλήματα που προκύπτουν, προέρχονται από τεμαχισμό είτε με βάση τη φυσική του αρχικού προβλήματος είτε με βάση θέματα παραλληλισμού. Αυτά τα μικρά προβλήματα μελετώνται ανεξάρτητα και επιλύονται με τις κατάλληλες μεθόδους (FEM, FD, κλπ.). Ωστόσο, υπάρχει σύζευξη μεταξύ των υποπροβλημάτων [22, 24, 25] στα κοινά σύνορα, που ονομάζονται διεπαφές (interfaces), έτσι ώστε να ικανοποιούνται συνθήκες και ιδιότητες του αρχικού προβλήματος (π.χ., συνέχεια και ομαλότητα της λύσης του αρχικού σύνθετου προβλήματος, ή ασυνέχεια στην παράγωγο της λύσης στο αρχικό πρόβλημα κλπ.).

Αρχικές συνθήκες ορίζονται πάνω στις διεπαφές και μεταφέρονται κατάλληλα ως συνοριακές συνθήκες στα επιμέρους προβλήματα. Αυτά επιλύονται ταυτόχρονα και οι προσεγγίσεις που προκύπτουν συνδυάζονται κατάλληλα μέσω κάποιας ΜΧΔ χρησιμοποιώντας την τιμή της λύσης ή/και της παραγώγου της πάνω στις διεπαφές για να παραχθούν καλύτερες προσεγγίσεις (πάνω στις διεπαφές). Κατά την ανάλυση των ΜΧΔ, μελετώνται θέματα μαθηματικής ανάλυσης, υπολογιστικής πολυπλοκότητας και θέματα υλοποίησης που έχουν να κάνουν με λογισμικό ή/και υλικό [11]. Η μαθηματική ανάλυση επιτυγχάνεται κυρίως σε απλά μοντέλα φυσικής καθώς δεν είναι εφικτό να αναλυθούν σε βάθος πραγματικά προβλήματα. Η χρήση υπάρχοντος λογισμικού είναι μεγάλης σημασίας στην υλοποίηση των ΜΧΔ. Υπάρχει πληθώρα πακέτων λογισμικού που υλοποιούν μεθόδους επίλυσης απλών προβλημάτων αλλά πρέπει να συνδυαστούν και υποστηριχθούν κατάλληλα σε επίπεδο λογισμικού αλλά και υλικού, για να επιλύσουμε σύνθετα προβλήματα

Η διαδικασία των ΜΧΔ είναι επαναληπτική [24] και περιγράφεται ως:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1. *Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν συνοριακές συνθήκες.*

2. *Επίλυση του κάθε απλού προβλήματος ΜΔΕ, ταυτόχρονα σε όλα τα υποχωρία με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες.*

3. *Σύγκριση των νέων τιμών (με τις προηγούμενες) πάνω στις διεπαφές. Υπολογισμός νέων βελτιωμένων τιμών χρησιμοποιώντας κατάλληλη ΜΧΔ.*

4. *Επιστροφή στο Βήμα 2, μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.*

Η διαδικασία χαλάρωση στη διεπαφή ποικίλει από απλό μέσο όρο τιμών της συνάρτησης από τα δυο υποχωρία που έχουν κοινό σύνορο τη διεπαφή, μέχρι την εφαρμογή πολύπλοκων τελεστών υψηλής τάξης ακρίβειας με κύριο σκοπό η λύση στο σύνθετο πρόβλημα να ικανοποιεί όλες τις απαραίτητες συνθήκες. Το παραπάνω επαναληπτικό σχήμα, ορίζεται σε επίπεδο φυσικής των προβλημάτων, επομένως η ανάλυση των μεθόδων απαιτεί γνώσεις μαθηματικής ανάλυσης και όχι αριθμητικής ανάλυσης [22, 25]. Τα κύρια πλεονεκτήματα της μεθόδου συνοψίζονται στα εξής: i) παρέχει την ακριβή σύζευξη των διαφόρων μοντέλων τόσο για τις ΜΔΕ όσο και για τις διεπαφές, ii) υποστηρίζει την επαναχρησιμοποίηση του λογισμικού που επιλύουν απλά μοντέλα φυσικής, iii) εισαγάγει ένα υψηλότερο επίπεδο παραλληλισμού στους υπολογισμούς, iv) ακολουθεί τη γεωμετρική και φυσική μοντελοποίηση ενός σύνθετου προβλήματος ΜΔΕ.

Ακολουθεί η μεθοδολογία της χαλάρωσης στη διεπαφή, για προβλήματα που προσομοιώνονται από δεύτερης τάξης ελλειπτικές ΜΔΕ. Τα επιμέρους προβλήματα ΜΔΕ δηλώνονται ως

$$L_i u_i = f_i \qquad \Omega_i \qquad i = 1, \ldots, p, \tag{3}$$

υποθέτοντας ότι τα Ω_i δεν αλληλοεπικαλύπτονται. Επίσης οι συνθήκες στις διεπαφές μπορούν να περιγραφούν μέσω έμμεσων σχημάτων/τύπων, όπως:

$$G_{i,j}\left(u_i, \frac{\partial u_i}{\partial \eta_{i,j}}; u_j, \frac{\partial u_j}{\partial \eta_{j,i}}; J_1, J_2\right) = 0 \qquad \Gamma_{i,j} \equiv \Omega_i \bigcap \Omega_j, \tag{4}$$

όπου $\eta_{i,j}$ το διάνυσμα με κατεύθυνση κάθετη στην διεπαφή $\Gamma_{i,j}$ και J_1, J_2 οι ποσότητες που δηλώνουν τις ασυνέχειες μέσω πηδήματος στην u ή/και την παράγωγό της. Το $G_{i,j}$ δηλώνει τον τελεστή που θα εφαρμοστεί στις u ή/και στις παραγώγους τους πάνω στην διεπαφή. Επίσης, υποθέτουμε την ύπαρξη συνοριακών συνθηκών στα σύνορα των χωρίων (που είναι υποσύνολα των συνόρων του γενικού χωρίου) αλλά και την ύπαρξη λύσης του κάθε επιμέρους προβλήματος ΜΔΕ.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στις εργασίες [21, 22, 24, 25] παρουσιάζονται κάποιες ΜΧΔ για ελλειπτικά προβλήματα. Από αυτές τις μεθόδους μελετήσαμε τη GEO και τη ROB. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι η GEO θέτει πάνω στην διεπαφή των χωρίων Ω_i και Ω_j την τύπου Dirichlet συνθήκη :

$$U_i^{New} = U_j^{New} = \frac{U_i^{Old} + U_j^{Old}}{2} - \rho_{ij} \left(\frac{\vartheta U_i^{Old}}{\vartheta \eta} - \frac{\vartheta U_j^{Old}}{\vartheta \eta} \right)$$

Η ROB πάνω στη διεπαφή που ορίζεται από τα χωρία Ω_i και Ω_j θέτει τις μεικτές συνθήκες

$$\frac{\vartheta U_i^{New}}{\vartheta \eta} + \lambda_{ij} * U_i^{New} = \frac{\vartheta U_j^{Old}}{\vartheta \eta} + \lambda_{ij} * U_j^{Old}$$

Τα παραβολικά σύνθετα προβλήματα μπορούν να αντιμετωπισθούν με όμοιες τεχνικές χαλάρωσης στις διεπαφές των επιμέρους χωρίων, ανάλογα με τους όρους της ΜΔΕ (εκτός του όρου με τη παράγωγο ως προς το χρόνο, π.χ., τους όρους που αφορούν σε reaction-diffusion, advection-diffusion ΜΔΕ. Αν η διαμέριση του αρχικού προβλήματος έχει πραγματοποιηθεί με βάση τη διαφορετικότητα των τελεστών, τότε προκύπτουν αλγόριθμοι που αποτελούν συνδυασμούς των αλγορίθμων στους Πίνακες 1 και 2. Αν η δημιουργία των επιμέρους προβλημάτων έχει βασιστεί πάνω στις ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά του χωρίου της ΜΔΕ (όπως στις ελλειπτικές ΜΔΕ), τότε ένα πιθανό σχήμα χαλάρωσης στη διεπαφή να είναι το ακόλουθο:

1. *Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν αρχικές συνθήκες. Αυτές υπολογίζονται με βάση την αρχική συνθήκη του σύνθετου προβλήματος*.

2. *Για κάθε βήμα στο χρόνο:*

   (α΄) *Ταυτόχρονη επίλυση, για ένα βήμα στο χρόνο, όλων των επιμέρους προβλημάτων εξέλιξης σε όλα τα υποχωρία με συνοριακές συνθήκες ορισμένες από τις αρχικές συνθήκες όπως έχουν ορισθεί στο βήμα 1 και φυσικά με αρχικές συνθήκες αυτές που επιβάλλει το αρχικό πρόβλημα*.

   (β΄) *Συνδυασμός τιμών της λύσης ή/και της παραγώγου των επιμέρους προβλημάτων πάνω στις διεπαφές (όπως και στην περίπτωση των ελλειπτικών προβλημάτων), για να χρησιμοποιηθούν ως νέες συνοριακές τιμές για τη λύση στο επόμενο χρονικό βήμα. Ο συνδυασμός που εφαρμόζει η ΜΧΔ επιβάλλει τις κατάλληλες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί το αρχικό σύνθετο πρόβλημα (συνέχεια, ομαλότητα, ασυνέχεια με πήδημα στη συνάρτηση/παράγωγο κλπ.)*.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3. *Εμφωλευμένες επαναλήψεις μπορεί να χρειαστούν ανάλογα με το πρόβλημα ΜΔΕ.*

Αυτό σχήμα αποτελεί πρόταση που χρειάζεται επιπλέον μελέτη και διερεύνηση.

2.3 Έλεγχος και επαλύθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη κανονικά πεδία

Ένα από τα προαπαιτούμενα για την εφαρμογή μίας μεθόδου χαλάρωσης στις διεπαφές, είναι ο εντοπισμός των σημείων που βρίσκονται στις διεπαφές των επιμέρους χωρίων. Σε αυτά τα σημεία θα χρειαστεί να υπολογίσουμε τη τιμή της λύσης του κάθε χωρίου, τις κατά κατεύθυνση παραγώγους και το προς τα έξω κάθετο στη διεπαφή διάνυσμα (outward normal vector), ώστε να εφικτό να υπολογισθεί νέα και βελτιωμένη τιμή στην συνθήκη πάνω στη διεπαφή που θα οδηγήσει σε σύγκλιση της μεθόδου. Η διαδικασία του εντοπισμού γειτονικών σημείων σε απλά προβλήματα με κυρτά χωρία απλής γεωμετρίας, (π.χ., ορθογώνιο παραλληλόγραμμο) είναι σχετικά εύκολη διαδικασία αφού η διεπαφή περιγράφεται με μια ευθεία. Ωστόσο, σε πιο πολύπλοκες γεωμετρίες (μη κυρτά χωρία, χωρία με τρύπες κλπ) είναι πιο δύσκολο από ένα σημείο μιας διεπαφής ενός χωρίου να εντοπισθούν τα κοντινότερα σημεία πάνω στην αντίστοιχη διεπαφή του γειτονικού χωρίου. Για να αντιμετωπίσουμε αυτό το πρόβλημα, εισάγουμε τη δημιουργία μιας λίστας με σημεία πάνω στα σύνορα του κάθε χωρίου και κατόπιν χρησιμοποιούμε τη δομή KDTree για να περιγράψει την γειτνίαση των σημείων. Οπότε για κάθε σημείο σε μια διεπαφή του ενός χωρίου ψάχνουμε στο KDTree του γειτονικού χωρίου για να εντοπίσουμε τα κοντινότερα σημεία ώστε να εφαρμόσουμε τη ΜΧΔ με τη σωστή πληροφορία και από τα δυο χωρία.

Ένα από τα μειονεκτήματα του λογισμικού FEniCS είναι ότι δεν παρέχει λειτουργικότητα για την εύρεση των σημείων στις διεπαφές.

Σε αυτή τη φάση του έργου αναπτύχθηκε η κατάλληλη υποδομή ώστε να είναι δυνατή η εύρεση των σημείων που ανήκουν στις διεπαφές των επιμέρους χωρίων στο περιβάλλον του λογισμικού FEniCS. Η μέθοδος που αναπτύχθηκε επιτρέπει στον χρήστη να εισάγει τα επιμέρους χωρία του προβλήματος. Στη συνέχεια, εντοπίζει τα σημεία που ανήκουν στις διεπαφές και τα καταχωρεί στις κατάλληλες δομές δεδομένων. Τέλος, η μέθοδος χαλάρωσης των τιμών στις διεπαφές, που χρησιμοποιείται, αξιοποιεί τις συγκεκριμένες δομές και έτσι έχει πρόσβαση στα σημεία όπου θα πρέπει να πραγματοποιηθεί ανανέωση των τιμών.

Η μέθοδος εφαρμόσθηκε στο πρόβλημα μελέτης της ανάπτυξης όγκων στον εγκέφαλο. Η αναγνώριση των επιμέρους χωρίων πραγματοποιήθηκε επιτυχώς, με κύριο πλεονέκτημα την μικρή υπολογιστική πολυπλοκότητα που απαιτεί ο αλγόριθμος εντοπισμού των σημείων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.4 Παράλληλοι Αλγόιθμοι ΜΧΔ

Στην παράγραφο 2.1 παρουσιάσαμε τη μεθοδολογία της χαλάρωσης στις διεπαφές. Παρατηρώντας τον γενικό αλγόριθμο είναι αντιληπτό ότι η συγκεκριμένη μεθοδολογία εμπεριέχει την έννοια του παραλληλισμού. Η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων στα επιμέρους χωρία μπορεί να πραγματοποιηθεί ταυτόχρονα ανά επανάληψη, καθώς τα επιμέρους προβλήματα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Όμοια μπορεί να αντιμετωπισθεί και η επίλυση των διεπαφών, αφού σε κάθε διεπαφή μπορούν να υπολογισθούν οι νέες τιμές ανά επανάληψη, παράλληλα και ανεξάρτητα από τις άλλες διεπαφές.

Στο συγκεκριμένο πακέτο εργασίας πραγματοποιήθηκε μελέτη της υλοποίησης της μεθόδου ROB σε κατανεμημένο περιβάλλον. Έτσι κατέστη δυνατή η επίλυση προβλημάτων μεγάλου μεγέθους, με μικρές απαιτήσεις σε υπολογιστικό χρόνο, με την εκμετάλλευση των σύγχρονων παράλληλων αρχιτεκτονικών.

Για την παραλληλοποίηση των μεθόδων βασιστήκαμε στο σχήμα παραλληλοποίησης μέσω ανταλλαγής μηνυμάτων (message passing). Ο τεμαχισμός των εργασιών (partitioning) πραγματοποιήθηκε σε επίπεδο των επιμέρους χωρίων. Στην πρώτη φάση, κάθε διεργασία επιλύει το πρόβλημα του χωρίου που της αντιστοιχεί. Στη συνέχεια, οι διεργασίες που είναι υπεύθυνες για τις επιμέρους διεπαφές επικοινωνούν μεταξύ τους για την ανταλλαγή των τιμών στα σημεία των διεπαφών, ανανεώνουν τις τιμές των σημείων και συνεχίζουν με την επόμενη επανάληψη. Το συγκεκριμένο σχήμα προσφέρει αρκετή ευελιξία σχετικά με τον τεμαχισμό των διεργασιών ενώ παράλληλα διατηρεί και μικρό το κόστος που απαιτείται για επικοινωνία.

Για την υλοποίηση των παράλληλων μεθόδων χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό RabbitMQ μέσα από το περιβάλλον του FEniCS. Εφαρμόσαμε την υλοποίηση σε ένα πρόβλημα-μοντέλο με τρία χωρία (τόσο με ομοιόμορφη όσο και με μη ομοιόμορφη διαμέριση των χωρίων) και έγινε σύγκριση με την παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου GEO.

Ταυτόχρονα, μελετήσαμε την παραλληλοποίηση των ΜΧΔ σε cloud περιβάλλοντα. Συγκεκριμένα, μελετήσαμε τη μέθοδο GEO, και με όμοιο τρόπο μπορεί η μελέτη να επεκταθεί και σε άλλες μεθόδους. Το κύριο χαρακτηριστικό της μεθοδολογίας της χαλάρωσης στις διεπαφές, είναι η δημιουργία μεγάλου πλήθους εργασιών, με πιθανή ανομοιογένεια στα επιμέρους χαρακτηριστικά όπως για παράδειγμα το μέγεθος του χωρίου και η μέθοδος διακριτοποίησης του, η μέθοδος επίλυσης της διαφορικής εξίσωσης, το πλήθος των διεπαφών ανά επιμέρους πρόβλημα, οι μέθοδοι αντιμετώπισης των διεπαφών κλπ. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, τα επιμέρους αυτά προβλήματα (είτε είναι επίλυση των επιμέρους διαφορικών προβλημάτων είτε είναι επίλυση προβλημάτων διεπαφών) μπορούν να αντιμετωπισθούν ταυτόχρονα ανά επανάληψη. Άρα η μεθοδολογία της χαλάρωσης στις διεπαφές δημιουργεί (μεγάλο) πλήθος ανομοιόμορφων (ή μη) εργασιών που εκτελούνται ταυτόχρονα και επικοινωνούν μεταξύ τους συχνά (ανά επανά-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ληψη) ενώ ο όγκος των δεδομένων της επικοινωνίας (δεδομένα στις διεπαφές) είναι αρκετά μικρότερος (κατά μια τάξη μεγέθους) από των όγκο των δεδομένων που επεξεργάζονται σε κάθε εργασία επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Τέτοιου είδους προβλήματα μπορούν αντιμετωπισθούν με πολύ αποδοτικό τρόπο σε περιβάλλοντα τύπου Cloud.

Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι το σύστημα που αναπτύχθηκε περιλαμβάνει τα ακόλουθα τμήματα:

- Το γραφικό περιβάλλον μέσω του οποίου εισάγονται από τον χρήστη τα χαρακτηριστικά των προβλημάτων προς επίλυση.
- Το σύστημα διαχείρισης της επικοινωνίας μεταξύ των οντοτήτων του συστήματος (AMQS)
- Την οντότητα διαχείρισης και καταμερισμού των εργασιών (task manager) στα επιμέρους συστήματα
- Το σύστημα αποθήκευσης
- Τις εικονικές μηχανές εκτέλεσης των προβλημάτων (execution VMs)

Για τη διαδικασία παραλληλοποίησης εκμεταλλευόμαστε τον παραλληλισμό σε επίπεδο domains, όπου κάθε domain επιλύεται ανεξάρτητα και στη συνέχεια γίνεται η ανανέωση των τιμών στα σημεία των interfaces. Έπειτα, η εκτέλεση συνεχίζει με την επόμενη επανάληψη.

Πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στην παράγραφο 3.2.

2.5 Έλεγχος και επαλήθευση αλγορίθμων με ασύγχρονη συμπεριφορά σε ελλειπτικά προβλήματα

Στις παραγράφους 2.1, 2.2 αλλά και στην 2.4 τονίσαμε την εγγενή παραλληλισιμότητα της Μεθοδολογίας της Χαλάρωσης στις διεπαφές. Ωστόσο, στα σχήματα που υλοποιούν Jacobi μεθοδολογία (βλ. Πίνακα 1 στην παράγραφο 2.1) η λύση όλων των προβλημάτων πραγματοποιείται διαδοχικά με τους υπολογισμούς των νέων βελτιωμένων τιμών πάνω σε όλες τις διεπαφές. Η διαχείριση των επιμέρους εργασιών, υλοποιημένες είτε σε κατανεμημένο σύστημα είτε σε περιβάλλον cloud, περιέχει δυο σημεία με φράγματα συγχρονισμού (barrier). Το ένα barrier συγχρονίζει τις λύσεις όλων των υποχωρίων, και το δεύτερο συγχρονίζει τους υπολογισμούς σε όλες τις διεπαφές. Οι συγχρονισμοί αυτοί πραγματοποιούνται σε κάθε επανάληψη της μεθόδου.

Ο αυστηρός συγχρονισμός είναι δυνατόν να προκαλέσει καθυστερήσεις στον υπολογισμό της λύσης του σύνθετου προβλήματος ειδικά όταν τα επιμέρους προβλήματα είναι ανομοιογενή τόσο ως προς τα μεγέθη των χωρίων όσο και τη

πολυπλοκότητα των ΜΔΕ και των μεθόδων διακριτοποίησης. Τη συγκεκριμένη συμπεριφορά την παρατηρήσαμε στα πειραματικά αποτελέσματα που περιγράφονται στην παράγραφο 3.2 και στα [1, 12, 23] όπου ο χρόνος ανά επανάληψη ταυτίζεται με το χρόνο εκτέλεσης του προβλήματος με το μεγαλύτερο υποχωρίου (αφού οι ΜΔΕ τελεστές στα επιμέρους προβλήματα είναι ίδιας πολυπλοκότητας).

Ακόμη και σχήματα που υλοποιούν μεθοδολογία τύπου Gauss-Seidel αντιμετωπίζουν το ίδιο πρόβλημα (σε μικρότερο ίσως βαθμό) καθώς για να υπολογισθεί η λύση σε ένα επιμέρους πρόβλημα θα πρέπει να έχουν υπολογισθεί οι λύσεις σε όλα τα γειτονικά υποχωρία με ταυτότητα μικρότερη από αυτή του συγκεκριμένου (βλ. Πίνακα 1 στην παράγραφο 2.1).

Για να αντιμετωπίσουμε τέτοιου είδους καθυστερήσεις προτείναμε μια ασύγχρονη προσέγγιση της εκτέλεσης των υπολογισμών των λύσεων των επιμέρους προβλημάτων και των υπολογισμών πάνω στις διεπαφές. Συγκεκριμένα σε κάθε υποχωρίο υπολογίζεται νέα λύση αρκεί να έχουν υπολογισθεί νέες τιμές τουλάχιστον σε μια από τις διεπαφές του υποχωρίου. Κατά συνέπεια μικρότερα χωρία ή χωρία με παραπάνω από μια διεπαφές μπορούν να υπολογίζουν νέες βελτιωμένες προσεγγίσεις όποτε αυτό είναι εφικτό, χωρίς να περιμένουν όλα τα γειτονικά υποχωρία να αναφέρουν τις νέες τιμές τους στις αντίστοιχες διεπαφές. με τη σειρά τους και οι υπολογισμοί στις διεπαφές δύναται να πραγματοποιηθούν έστω και αν μόνο ένα από τα υποχωρία της διεπαφής παρέχει νέες τιμές.
Οι συνέπειες της ασύγχρονης εκτέλεσης των διεργασιών είναι: (i) μεγαλύτερη επικάλυψη των υπολογισμών μεταξύ τους αλλά και με την επικοινωνία σε σχέση με τον συγχρονισμένο τρόπο εκτέλεσης (ii) αποδοτικότερη χρήση των υπολογιστικών πόρων (iii) μικρότερο συνολικό χρόνο εκτέλεσης της ΜΧΔ, καθώς συνεχείς βελτιώσεις στις λύσεις υπολογίζονται συνεχώς και η πιθανότητα να επιτευχθεί σύγκλιση σε συντομότερο χρονικό διάστημα αυξάνει και εξαρτάται από τη μορφή του σύνθετου προβλήματος, την ανομοιογένεια των χωρίων και της πολυπλοκότητας των διαφορικών εξισώσεων.

Πρώτα αποτελέσματα παρουσιάζονται στην παράγραφο 3.3.

3 Αποτελέσματα

3.1 Μεθόδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για σύνθετα προβλήματα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων

Για την επαλήθευση των αλγορίθμων και στις δυο μεθόδους (GEO, ROB) χρησιμοποιήσαμε ένα πρόβλημα ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων με 2 δια-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

		Ομοιόμορφο πρόβλημα			Μη-Ομοιόμορφο πρόβλημα		
case	h	left	middle	right	left	middle	right
c1	0.1	4x21	4x6	4x11	3x21	4x6	6x11
c2	0.05	8x41	8x11	8x21	5x41	7x11	11x21
c3	0.025	14x81	14x21	14x41	9x81	13x21	21x41
c4	0.0125	28x161	28x41	28x81	17x161	25x41	41x81
c5	0.00625	55x321	55x81	55x161	33x321	49x81	81x161
c6	0.003125	108x641	108x161	108x321	65x641	97x161	161x321
c7	0.0015625	214x1281	214x321	214x641	129x1281	193x321	321x641

Πίνακας 3: Περιπτώσεις που εξετάσθηκαν με διαφορετικά βήματα διακριτοποίησης και μεγέθη πλέγματος των χωρίων για τα 3 χωρία των 2 προβλημάτων.

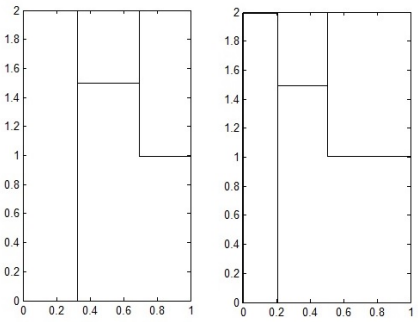
φορετικά χωρία που εμφανίζονται στο Σχήμα 1.

$$Lu\left(x,y\right) \equiv -\nabla u\left(x,y\right) + \gamma^2 u\left(x,y\right) = f\left(x,y\right), \quad \left(x,y\right) \in \Omega$$
$$u\left(x,y\right) = u^b\left(x,y\right), \quad \left(x,y\right) \in \partial\Omega$$

όπου $f\left(x,y\right)$ and $u^b\left(x,y\right)$ τέτοια ώστε η λύση του προβλήματος να είναι η:

$$u\left(x,y\right) = e^{y(x+4)}x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5) \tag{5}$$

Οι διεπαφές για το ομοιόμορφα (ως προς τον άξονα των x) τεμαχισμένο χωρίο βρίσκονται στις ευθείες $x = x_1 = \frac{1}{3}$ και $x = x_2 = \frac{2}{3}$ και για το μη ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο στις $x = x_1 = \frac{1}{5}$ και $x = x_2 = \frac{1}{2}$ ενώ $\gamma^2 = 2$.



Σχήμα 1: Ομοιόμορφα (ως προς τον άξονα των x) τεμαχισμένο χωρίο (αριστερά) και Μη Ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο (δεξιά)

Αρχικά, χρησιμοποιήσαμε το Matlab για πρωτοτυποποίηση και επαλήθευση των μεθόδων ΧΔ και πήραμε αποτελέσματα που επιβεβαίωναν την θεωρητική σύγκλιση στη λύση του αρχικού προβλήματος. Ωστόσο, για πολλούς λόγους μεταφέραμε τις εργασίες μας στο FENICS. Το βασικό μειονέκτημα του Matlab είναι ότι χειρίζεται προβλήματα ΜΔΕ το πολύ 2 διαστάσεων, ενώ τα προβλήματα από τις εφαρμογές του έργου (πρόβλημα Ιατρικής και πρόβλημα υφαλμύρισης) είναι προβλήματα τριών διαστάσεων. Επιπλέον η χρήση λογισμικού open source στο

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

έργο θεωρήθηκε μεγάλης σημασίας και όλες οι ομάδες αποφάσισαν από κοινού στην χρήση του FENICS για την αντιμετώπιση των προβλημάτων ΜΔΕ.

Στην πρώτη προσπάθεια χρήσης του FENICS, υλοποιήθηκαν οι μέθοδοι σειριακά, χωρίς να κάνουμε χρήση του παραλληλισμού της μεθοδολογίας ΧΔ για να επιβεβαιώσουμε τη σύγκλιση στη λύση του αρχικού γενικού προβλήματος. Το επόμενο βήμα στα πειραματικά αποτελέσματα των ΜΧΔ ήταν η επαλήθευση του παραλληλισμού που τις διέπουν, οπότε και υλοποιήθηκαν οι μέθοδοι παράλληλα μέσα στο FENICS. Διεξήχθησαν πειράματα για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διακριτοποίησης h, η οποία λαμβάνει ίδιες τιμές ως προς την x και την y κατεύθυνση. Τα παραγόμενα πλέγματα καταγράφονται στον Πίνακα 3, ενώ το πλήθος των σημείων στις διεπαφές είναι ίσο με το πλήθος των σημείων στη y κατεύθυνση του πλέγματος του μεσαίου χωρίου, δηλαδή αυξάνει από 6 εως 641 σημεία και στα δύο προβλήματα. Στο ομοιόμορφο πρόβλημα το αριστερό χωρίο είναι κατά πολύ μεγαλύτερο σε σχέση με τα άλλα δυο χωρία. Στο μη ομοιόμορφο πρόβλημα το μεγαλύτερο χωρίο είναι το δεξί με σημαντικά αυξημένο κόστος υπολογισμών. Οι διεπαφές και στα δυο προβλήματα έχουν το ίδιο πλήθος σημείων και κατά συνέπεια ίδιο φόρτο εργασίας.

Ο τρόπος σύγκλισης αποτυπώνεται στη Σχήμα 2. Στο Σχήμα 2α΄ εμφανίζεται η νόρμα μεγίστου των σχετικών διαφορών των διαδοχικών προσεγγίσεων της λύσης ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων στη διεπαφή $x = x_1 = \frac{1}{3}$ για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για $h = 0.1, 0.05, 0.025$. Επιβεβαιώνεται ότι οι μέθοδοι ΧΔ είναι ανεξάρτητες από την παράμετρο διακριτοποίησης h. Παραμένοντας στο ίδιο πρόβλημα και την ίδια διεπαφή, εμφανίζουμε την ακριβή λύση και τις προσεγγιστικές λύσεις του προβλήματος για τις επαναλήψεις $1, 3, 6, 10$ με $h = 0.05$. Παρόμοια αποτελέσματα λαμβάνουμε και για την άλλη διεπαφή του ομοιόμορφου προβλήματος αλλά και για τις δυο διεπαφές του μη-ομοιόμορφου προβλήματος.

Στα πλαίσια εφαρμογής των ΜΧΔ σε προβλήματα εξέλιξης, θεωρήσαμε ένα μονοδιάστατο παραβολικό πρόβλημα πολλαπλών χωρίων το οποίο αποτελεί απλή προσομοίωση της συμπεριφοράς υγειών και καρκινικών κυττάρων στο εγκέφαλο. Το πρόβλημα περιγράφεται στο [3] και συνοψίζεται στη ΜΔΕ:

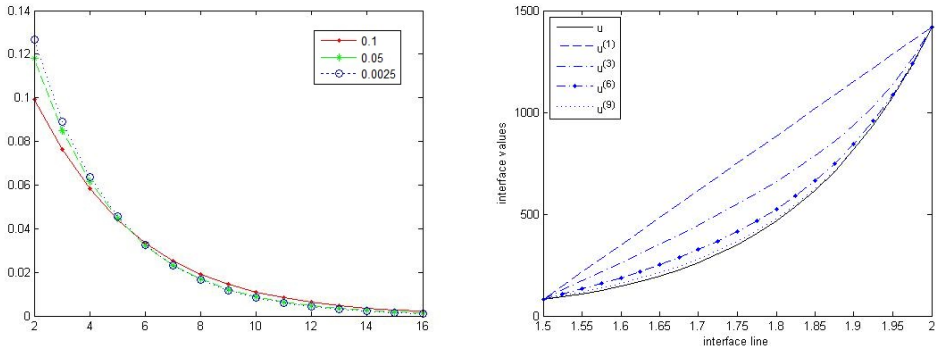
$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x \ , \quad x \in [a,b] \ , \quad t \geq 0 \\ u_x(\alpha, t) = 0 \ , \quad u_x(b,t) = 0 \\ u(x,0) = f(x) \end{cases} \tag{6}$$

όπου

$$D(x) = \begin{cases} \gamma \ , & a \leq x \leq \omega_1 \\ 1 \ , & \omega_1 \leq x \leq \omega_2 \\ \gamma \ , & \omega_2 \leq x \leq b \end{cases} \tag{7}$$

και $\gamma = \frac{D_g}{D_w} < 1$ είναι μια σταθερά που περιγράφει τον συντελεστή διάχυσης μεταξύ γκρί και υγειών περιοχών του εγκεφάλου. Επίσης $\alpha = -5, \omega_1 = -1, \omega_2 =$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(α΄) (β΄)

Σχήμα 2: Σύγκλιση της μεθόδου GEO για το ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο. Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων (2α΄) και ακριβής και προσεγγιστική λύση στη διεπαφή (2β΄).

$1, b = 5, \gamma = 0,5$ και

$$f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\eta^2}.$$

Το πρόβλημα έχει αντιμετωπισθεί στο [3] με μη συνεχείς Galerkin Collocation μεθόδους και χρησιμοποιήσαμε αυτή την υλοποίηση για να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα από την υλοποίηση πολλαπλών συνεχών Galerkin μεθόδων με ΜΧΔ. Δεν υπάρχουν δημοσιευμένα αποτελέσματα και τα πειραματικά δεδομένα χρειάζονται περισσότερη μελέτη.

3.2 Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ

Για την υλοποίηση των ΜΧΔ σε κατανεμμημένο περιβάλλον χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό RabbitMQ μέσα από το περιβάλλον του FEniCS και η μέθοδος ROB. Στο περιβάλλον cloud που αναπτύξαμε (IRaaS), υλοποιήσαμε τη μέθοδο GEO. Για την επαλήθευση της παραλληλισιμότητας των αλγορίθμων και στις δυο υλοποιήσεις χρησιμοποιήσαμε το ελλειπτικό πρόβλημα που έχουμε ορίσει στην παράγραφο 3.1.

Από τα πειραματικά αποτελέσματα, παρατηρήσαμε ότι και οι δυο παράλληλες υλοποιήσεις μειώνουν σημαντικά τον χρόνο εκτέλεσης των προβλημάτων. Συγκεκριμένα ενώ στις σειριακές υλοποιήσεις σε κάθε επανάληψη το υπολογιστικό κόστος είναι το άθροισμα του πλήθους των υπολογισμών του κάθε επιμέρους προβλήματος, στην παράλληλη υλοποίηση το κόστος κάθε επανάληψης ταυτίζεται με το κόστος του μεγαλύτερου υποπροβλήματος. Στην περίπτωση ομοιόμορφων υποπροβλημάτων το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη της

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

μεθόδου είναι ίσο με το κόστος της σειριακής υλοποίησης διαιρεμένο με το πλήθος των υποπροβλημάτων.

Στον πίνακα 4 καταγράφονται οι συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO [1] μέσω της πλατφόρμας του FEniCS. Η σειριακή υλοποίηση έχει εκετελεσθεί σε υπολογιστικό κόμβο με 4 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620, 2.00GHz επεξεργαστές και 2GB RAM και η παράλληλη υλοποίηση σε 3 ίδιας ισχύος κόμβους, στην Cloud υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων του Πανεπιστημίου Πατρών (CEID-UP).
Οι χρόνοι της σειριακής εκτέλεσης αφορούν στους χρόνου υπολογισμών των τριών χωρίων για 16 επαναλήψεις. Οι χρόνοι της παράλληλης υλοποίησης αντιστοιχούν στους χρόνους υπολογισμών του μεγαλύτερου υποχωρίου μαζί με τους υπολογισμούς στις διεπαφές του χωρίου για 16 επαναλήψεις. Καθώς η παράμετρος της διακριτοποίησης μικραίνει, το υπολογιστικό κόστος αυξάνει σημαντικά ενώ το κόστος της επικοινωνίας αυξάνει κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερη. Έτσι η εξοικονόμηση χρόνου είναι εμφανής για λεπτότερες διαμερίσεις.

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7
				Uniform Problem			
Serial	1.900	2.664	5.216	12.883	40.883	178.217	996.348
Parallel	3.495	4.068	6.140	13.595	39.808	154.633	723.731
				Non Uniform Problem			
Serial	2.294	2.854	5.111	13.251	37.266	179.561	1057.644
Parallel	3.720	4.264	5.732	10.633	34.172	126.607	918.838

Πίνακας 4: Συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO.

Από τη υλοποίηση της κατανεμημένης ROB ενδεικτικά πειραματικά αποτελέσματα καταγράφονται στον Πίνακα 5 όπου συγκρίνονται με τους χρόνους της GEO από το περιβάλλον cloud. Οι χρόνοι περιέχουν υπολογισμούς στα υποχωρία, στις διεπαφές αλλά και το κόστος επικοινωνίας για 15 επαναλήψεις.

Προβλήματα	ROB	GEO
C1	16.004	15.495
C2	16.281	16.068
C3	17.392	18.140
C4	23.634	25.595
C5	45.456	51.808
C6	132.179	166.633
C7	899.050	735.731

Πίνακας 5: Συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της παράλληλης υλοποίησης της ROB και GEO.

Παρατηρούμε ότι οι χρόνοι και στις δύο μεθόδους στα δυο διαφορετικά περιβάλλοντα είναι ίδιας τάξης. Αυτό είναι αναμενόμενο, αφού και το κόστος των υπολογισμών και στις 2 μεθόδους ΧΔ είναι γραμμικό ως προς το πλήθος των σημείων της διεπαφής.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

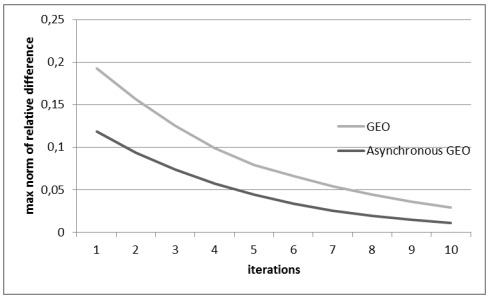
Η επιβάρυνση που προκαλεί η επικοινωνία, στην περίπτωση του κατανεμημένου περιβάλλοντος, δεν είναι σημαντική καθώς το μέγεθος των δεδομένων είναι κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερο από το πλήθος των δεδομένων που επεξεργάζονται οι διεργασίες που επιλύουν τις διαφορικές εξισώσεις Για την περίπτωση του IRaaS, η επιβάρυνση από την επικοινωνία μεταξύ των επιμέρους εργασιών και τη διαχείρηση των υπολογιστικών πόρων είναι εξίσου χαμηλή και δεν προσθέτει ουσιαστικά στο κόστος των μεγάλους κόστους εργασιών.

Από τα κύρια χαρακτηριστικά ενός cloud περιβάλλοντος είναι η μεγάλη υπολογιστική ισχύ μέσω των διασυνδεδεμένων υπολογιστικών συστημάτων, η μεγάλη διαθεσιμότητα όπως επίσης και η αποδοτικότητα υπολογισμών μέσω της παροχής διαφορετικών συστημάτων. Έτσι, μία υλοποίηση σε Cloud περιβάλλον μπορεί να επιτύχει σημαντική μείωση του χρόνου εκτέλεσης ενώ παράλληλα να εκμεταλλευτεί με τον καλύτερο δυνατό τρόπο τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους μέσω της ανάθεσης των διεργασιών σε πόρους του συστήματος με αντίστοιχα χαρακτηριστικά (υπολογιστική ισχύ, διαθέσιμη μνήμη, κλπ.).

Για την πειραματική αξιολόγηση της μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε ένα μοντέλο-πρόβλημα με τρία χωρία που ορίσθηκε στην παράγραφο 3.1. Όπως παρατηρήσαμε, η προτεινόμενη υλοποίηση επιτυγχάνει γραμμική μείωση του χρόνου εκτέλεσης, ανάλογα με τα VMs που χρησιμοποιούνται. Ένα ακόμη πλεονέκτημα της προτεινόμενης υλοποίησης είναι η αποδοτική χρήση των διαθέσιμων πόρων μέσω της εκτέλεσης των VMs με την βέλτιστη υπολογιστική ισχύ και μνήμη για την επίλυση του αντίστοιχου προβλήματος.

3.3 Έλεγχος και επαλήθευση αλγορίθμων με ασύγχρονη συμπεριφορά

Υλοποιήσαμε την ασύγχρονη μεθοδολογία χαλάρωσης στις διεπαφές και χρησιμοποιήσαμε το ελλειπτικό πρόβλημα της παραγράφου 3.1, για πειραματισμό.



Σχήμα 3: Ιστορικό σύγκλισης της GEO και ασύγχρονης GEO στη διεπαφή 1 του προβλήματος c1.

Στο Σχήμα 3 απεικονίζεται το ιστορικό σύγκλισης μέσα από τη νόρμα μεγί-

στου των σχετικών διαφορών διαδοχικών επαναλήψεων ως προς τις επαναλήψεις που που εκτελέσθηκαν. Τα αποτελέσματα αφορούν στην πρώτη διεπαφή του προβλήματος c1 για τη σύγχρονη και ασύγχρονη υλοποίηση της GEO. Παρατηρούμε ότι η ασύγχρονη μέθοδος επιτυγχάνει ταχύτερη σύγκλιση από τη σύγχρονη για το συγκεκριμένο πρόβλημα.

Στον Πίνακα 6 καταγράφονται οι χρόνοι εκτέλεσης των 2 παράλληλων υλοποιήσεων της GEO, σύγχρονη και ασύγχρονη. Στην πρώτη περίπτωση ο συνολικός χρόνος αντιστοιχεί στο χρόνο λύσης των τριών υποχωρίων, στους υπολογισμούς των διεπαφών και στην απαραίτητη επικοινωνία για 15 επαναλήψεις. Στην ασύγχρονη εκδοχή, ο χρόνος αντιστοιχεί στις 15 επαναλήψεις του μεσαίου χωρίου, καθώς μόνο αυτό χρειάστηκε να κάνει τόσες επαναλήψεις. Οι χρόνοι εκτέλεσης της ασύγχρονης μεθόδου είναι σημαντικά μικρότεροι σε σχέση με την σύγχρονη μέθοδο, ειδικά καθώς τα πλέγματα διακριτοποίησης γίνονται πιο λεπτά και άρα τα προβλήματα έχουν μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος.

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7
Asynchronous GEO	12.12	12.361	11.81	7.727	14.805	38.022	256.084
Synchronous GEO	3.495	4.068	6.14	13.595	39.808	154.633	723.731

Πίνακας 6: Χρόνοι εκτέλεσης της GEO (ασύγχρονη και σύγχρονη εκδοχή).

Τα αποτελέσματα βρίσκονται σε αρχικό στάδιο και χρειάζεται παραπέρα μελέτη της ασύγχρονης μεθόδου τόσο σε θεωρητικό όσο και σε πειραματικό επίπεδο.

3.4 Έλεγχος και επαλήθευση των ΜΧΔ σε προβλήματα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου.

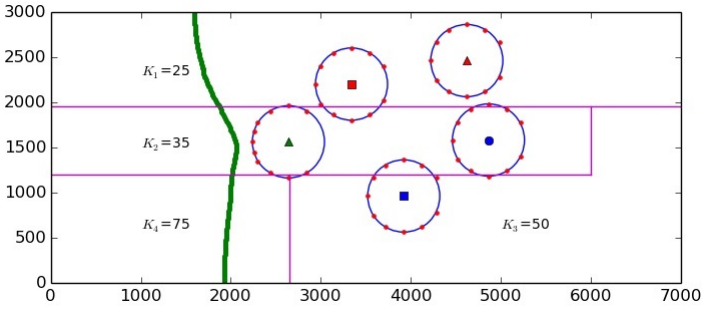
Εκτός το μονοδιάστατο πρόβλημα ΜΔΕ πολλαπλών χωρίων που προσομοιώνει το πρόβλημα της Ιατρικής, προσπαθήσαμε να χρησιμοποιήσουμε ΜΧΔ και στο πρόβλημα της υφαλμύρισης σε περιοχή με πηγάδια στη Κάλυμνο.

Το πρόβλημα σταθερής κατάστασης υφαλμύρισης, περιγράφεται [2] με την ελλειπτική ΜΔΕ

$$\frac{\vartheta}{\vartheta x}\left(K\frac{\vartheta \phi}{\vartheta x}\right)+\frac{\vartheta}{\vartheta y}\left(K\frac{\vartheta \phi}{\vartheta y}\right)+N-Q=0$$

όπου ϕ το δυναμικό ροής του Strunk, N η ημερήσια επαναφόρτιση του υδροφορέα η οποία θεωρείται ομοιόμορφη σε όλο το χωρίο, K η υδραυλική διαπερατότητα και Q η ημερήσια αποφόρτιση του υδροφορέα. Η υδραυλική διαπερατότητα διαφέρει σε κάθε υποχωρίο, όπως φαίνεται μέσα από το Σχήμα 6 και οι ρυθμοί άντλησης είναι $252m^3/day, 450m^3/day, 749m^3/day, 1045m^3/day$ και $1270m^3/day$ στα 5 πηγάδια που φαίνονται στο σχήμα με το χωρίο της διαφορικής

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 4: Υδροφορέας στην Κάλυμνο.

(δηλ. ο υδροφορέας της Καλύμνου) που απεικονίζεται στο Σχήμα 6. Στα σύνορα του σύνθετου προβλήματος οι συνθήκες είναι $\frac{\vartheta\phi}{\vartheta\eta} = 0$ για τα σύνορα $y = 0$ και $y = 3000$ ενώ στο $x = 0, \phi = 0$ και για $x = 7000, \frac{\vartheta\phi}{\vartheta\eta} = 1,23$.

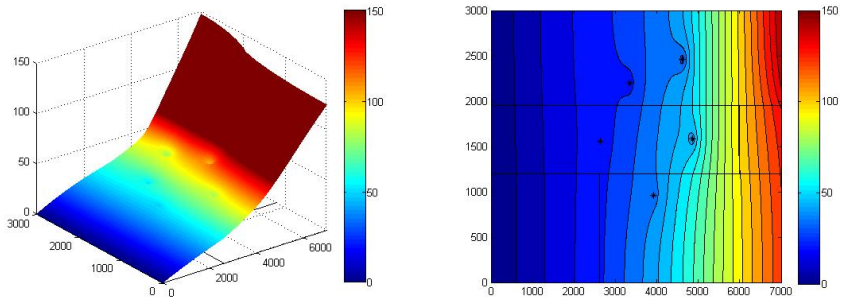
Η ομάδα ΚΕΟ 1 του Πολυτεχνείου Κρήτης υλοποίησε τη μέθοδο ALOPEX μέσα στο FENICS και αντιμετώπισε το συγκεκριμένο πρόβλημα. Τα αποτελέσματα απεικονίζονται στο Σχήμα 5. Συγκεκριμένα στο Σχήμα 5α΄ απεικονίζεται το δυναμικό ροής στις 3 διαστάσεις ενώ στο εμφανίζονται οι ισοϋψείς καμπύλες της λύσης τη ΔΕ και τα σημεία-πηγάδια που η άντληση αλλάζει το δυναμικό της ροής τοπικά. Στα Σχήματα 5γ΄ και 5δ΄ απεικονίζονται οι παράγωγοι της λύσης ως προς x και y αντίστοιχα. Παρατηρούμε τις πολύ μικρές τιμές τους εκτός από τις περιοχές γύρω από τα πηγάδια που αυξάνουν με μέγιστες τιμές το $0,6272$ και το $0,6005$ αντίστοιχα. Άμεση συνέπεια αυτών είναι ότι η $\vartheta u/\vartheta\eta$ στις οριζόντιες διεπαφές είναι ίση με τη $\vartheta u/\vartheta y$ με πολύ μικρές, σχεδόν μηδενικές τιμές. Στις κάθετε διεπαφέ η $\vartheta u/\vartheta\eta$ ταυτίζεται με τη $\vartheta u/\vartheta x$ η οποία έχει μεγαλύτερες τιμές και άρα μπορεί να συμβάλλει ουσιαστικότερα στη βελτίωση της τιμής μέσω από μια ΜΔΧ.

Χρησιμοποιήσαμε τη GEO και τη ROB για να λύσουμε το πρόβλημα των 5 χωρίων όπως αυτά περιγράφονται στο Σχήμα 6 και λαμβάνοντας υπόψιν μια ακόμη διεπαφή το ευθύγραμμο τμήμα $y = 1200, 6000 \leq x \leq 7000$ έτσι ώστε όλα τα επιμέρους χωρία να είναι ορθογώνια παραλληλόγραμμα.

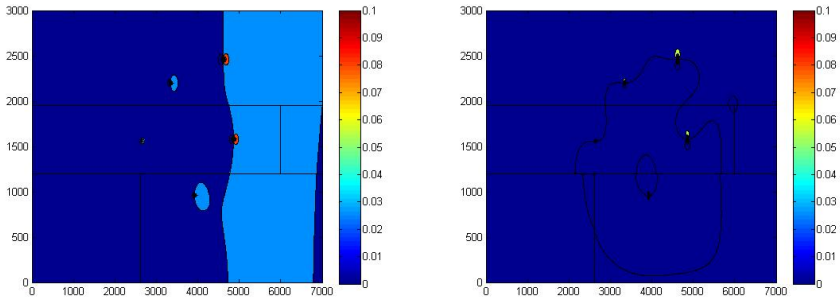
Αρχικά χρησιμοποιήσαμε σαν αρχική συνθήκη πάνω στις διεπαφές τη συνάρτηση $u^{(0)} = 1/50 * x$, η οποία έχει $\vartheta u/\vartheta y = 0$, με αποτέλεσμα οι αντίστοιχοι όροι που εμφανίζονται μέσα στις IR μεθόδους για τις οριζόντιες διεπαφές να μην συνεισφέρουν καθόλου και έτσι η λύση να μένει καρφωμένη στην αρχική συνθήκη η οποία είναι κοντά στη λύση για $x = 0$ και $x = 7000$. Θυμίζουμε ότι η GEO θέτει πάνω στην διεπαφή των χωρίων Ω_i και Ω_j την τύπου Dirichlet συνθήκη :

$$U_i^{New} = U_j^{New} = \frac{U_i^{Old} + U_j^{Old}}{2} - \rho_{ij}\left(K_i * \frac{\vartheta U_i^{Old}}{\vartheta\eta} - K_j * \frac{\vartheta U_j^{Old}}{\vartheta\eta}\right)$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

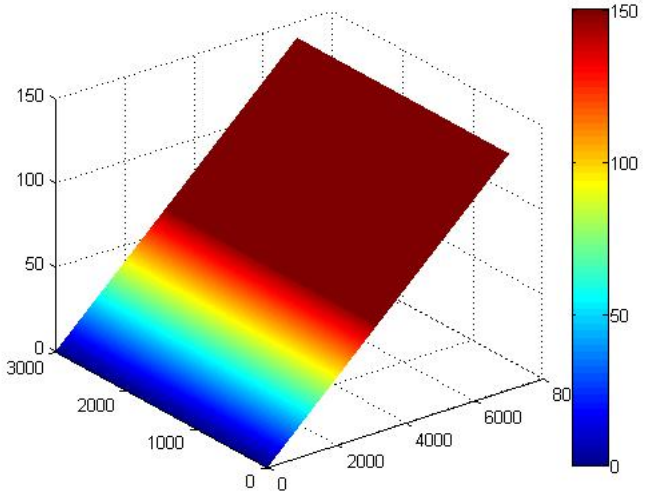


(α΄) 3Δ αναπαράσταση της λύσης. (β΄) Ισοϋψείς καμπύλες της λύσης.



(γ΄) Ισοϋψείς καμπύλες της λύσης κατά την x κατεύθυνση. (δ΄) Ισοϋψείς καμπύλες της λύσης κατά την y κατεύθυνση.

Σχήμα 5: Λύση του προβλήματος από την ΚΕΟ 1 με χρήση ALOPEX-FENICS.



Σχήμα 6: Συνάρτηση που λαμβάνεται ως αρχική συνθήκη πάνω στις διεπαφές.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Χρησιμοποιώντας $\rho_{ij} = 0,5$ παίρνουμε αποτελέσματα που απεικονίζονται στα Σχήματα 7α΄ - 7η΄.

Τα πειραματικά αποτελέσματα επιβεβαιώνουν την θεωρητική παρατήρηση για ελάχιστη βελτίωση, έως και μηδενικές διαφορές από επανάληψη σε επανάληψη, αν οι κάθετες στις διεπαφές παράγωγοι είναι 0 ή σχεδόν μηδέν τόσο για την αρχική συνθήκη όσο και για την λύση του προβλήματος. Όμοια αποτελέσματα είχαμε και για άλλες τιμές στην παράμετρο ρ_{ij}.

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα χρησιμοποιήσαμε και την ROB η οποία πάνω στη διεπαφή που ορίζεται από τα χωρία Ω_i και Ω_j θέτει τις μεικτές συνθήκες

$$K_i * \frac{\vartheta U_i^{New}}{\vartheta \eta} + \lambda_{ij} * U_i^{New} = K_j * \frac{\vartheta U_j^{New}}{\vartheta \eta} + \lambda_{ij} * U_j^{Old}$$

Τα πειραματικά αποτελέσματα απεικονίζονται στο Σχήμα 8 θέτοντας $\lambda_{ij} = 1,15$ στις οριζόντιες διεπαφές και $\lambda_{ij} = 1,11$ στις κάθετες.

Παρατηρούμε ότι οι μεικτές συνθήκες της ROB ανάλογα με τις τιμές του λ έχουν συμπεριφορά τύπου Dirichlet, για μεγάλες τιμές του λ, ή τύπου Newmann μια μικρές τιμές του λ αντίστοιχα. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα δοκιμάσαμε μεγάλες τιμές για το λ (π.χ., 5, 10, 50 κλπ.) και τα αποτελέσματα δεν ήταν ενθαρρυντικά, κάτι που περιμένουμε αφού όπως εξηγήσαμε, με συνθήκες τύπου Dirichlet και μηδενικές παραγώγους σε αρχικές τιμές, οι τιμές στις διεπαφές δεν αλλάζουν όσο χρειάζεται για να προχωρήσουμε προς τη λύση. Δοκιμάσαμε και με αρκετά μικρότερες (π.χ., 0,5, 0,01 κλπ.) και πάλι η συμπεριφορά της μεθόδου δεν είναι η αναμενόμενη. Για $\lambda_{ij} = 1,15$ και $1,11$ η ROB συμπεριφέρεται καλύτερα, επιτυγχάνοντας την καμπυλότητα της λύσης αλλά εξακολουθεί να βρίσκεται μακρυά από τη λύση του ALOPEX-FENICS.

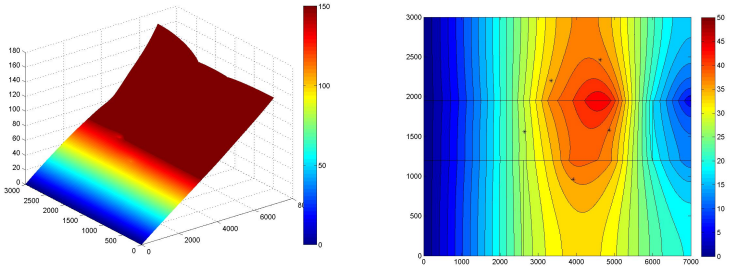
Από τις διαφορές των λύσεων με ΜΧΔ και του ALOPEX παρατηρούμε ότι υπάρχει μεγάλη διαφορά στο κεντρικό μέρος όλου του υδροφορέα, στην περιοχή που βρίσκονται τα πηγάδια. Και οι δυο μέθοδοι αντιμετωπίζουν την ίδια δυσκολία, η οποία είναι να εντοπίσουν την ανωμαλία και να την διορθώσουν στην πορεία των επαναληπτικών βημάτων και εμφανίζουν την ίδια συμπεριφορά. Αυτό συμβαίνει, όπως εξηγήσαμε προηγουμένως, γιατί οι κατά κατεύθυνση παράγωγοι είναι μηδέν οπότε οι όροι των παραγώγων στις εξισώσεις των ΜΧΔ δεν συμβάλλουν καθόλου στην βελτίωση της λύσης στις διεπαφές και άρα στο γενικό χωρίο.

Επόμενο βήμα στους πειραματισμούς ήταν η αρχική συνθήκη να εξαρτάται από το y και άρα η $\theta u/\theta y$ να είναι διάφορη του 0, ώστε τόσο η διαφορική εξίσωση όσο και η ΜΧΔ να εντοπίσουν διαφορετικές τιμές και να προσπαθήσουν να τις διορθώσουν. Ορίσαμε ως αρχική συνθήκη την

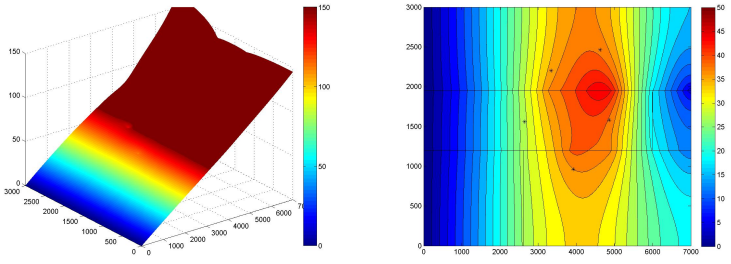
$$u^{(0)} = x/50 + ((y * (3000 - y)/2250000) * 20)$$

και τα πειραματικά αποτελέσματα αναπαριστώνται στο Σχήμα 9 με $\lambda = 1$ σε όλες τις διεπαφές. Στο Σχήμα 9 παρατηρούμε ότι η μη ομαλότητα στην πρώτη

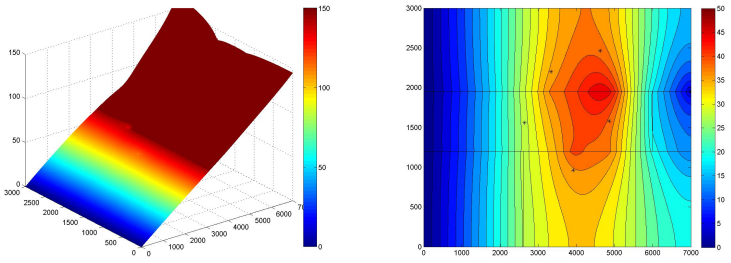
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



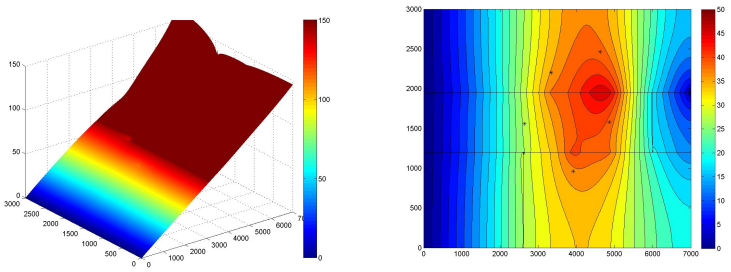
(α΄) u^1 (β΄) $|u^1 - U_{Alopex}|$



(γ΄) u^2 (δ΄) $|u^2 - U_{Alopex}|$



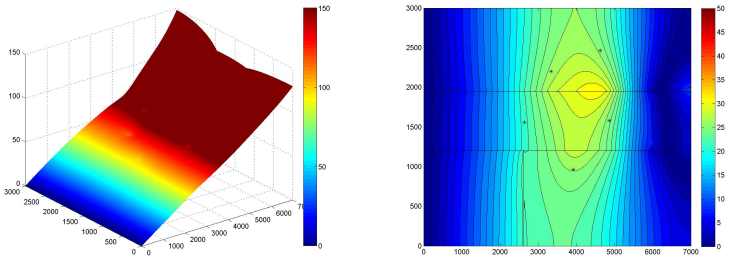
(ε΄) u^3 (στ΄) $|u^3 - U_{Alopex}|$



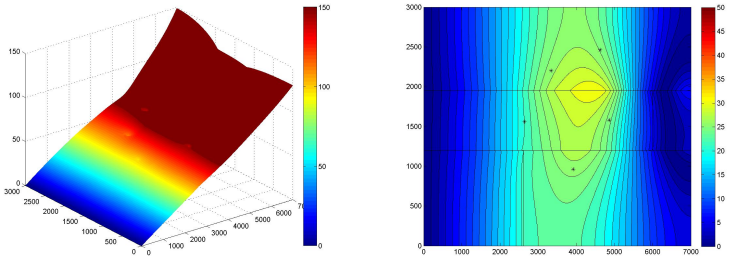
(ζ΄) u^4 (η΄) $|u^4 - U_{Alopex}|$

Σχήμα 7: Λύσεις του προβλήματος με GEO στις 4 πρώτες επαναλήψεις με αρχική συνθήκη την $u^{(0)} = 1/50 * x$, $\rho_{ij} = 0,5$ και οι απόλυτες διαφορές τους από τη λύση του προβλήματος με ALOPEX - FENICS (KEO1).

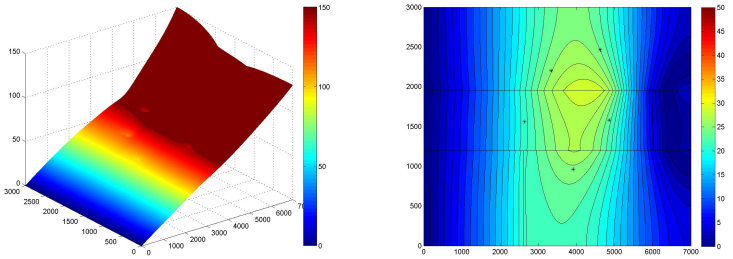
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



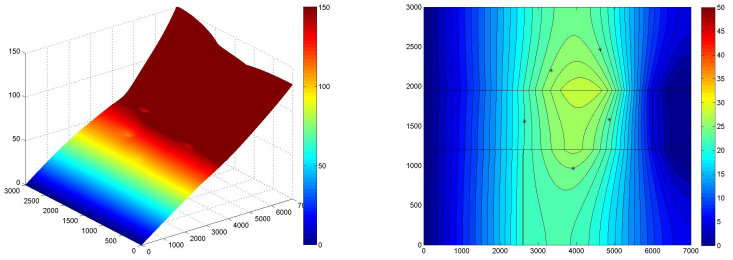
(α΄) u^2 (β΄) $|u^2 - U_{Alopex}|$



(γ΄) u^3 (δ΄) $|u^3 - U_{Alopex}|$



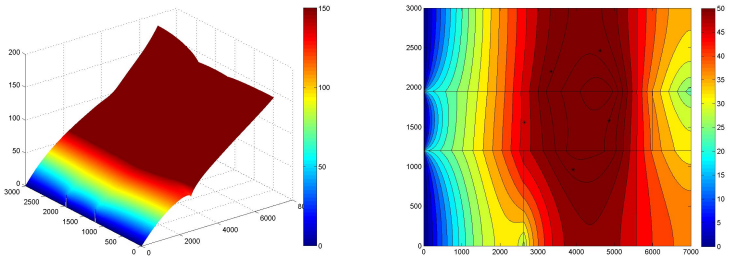
(ε΄) u^5 (στ΄) $|u^5 - U_{Alopex}|$



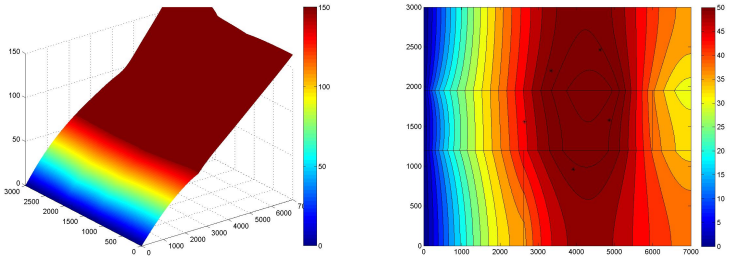
(ζ΄) u^7 (η΄) $|u^7 - U_{Alopex}|$

Σχήμα 8: Λύσεις του προβλήματος με ROB, στις επαναλήψεις 2, 3, 5 και 7 με αρχική συνθήκη την $u^{(0)} = 1/50 * x$, $\lambda_{ij} = 1,15$ και $1,11$ για τις οριζόντιες και κάθετες διεπαφές αντίστοιχα και οι απόλυτες διαφορές τους από τη λύση του προβλήματος με ALOPEX - FENICS (KEO1).

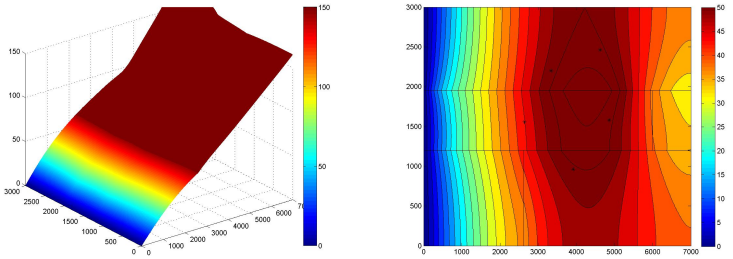
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



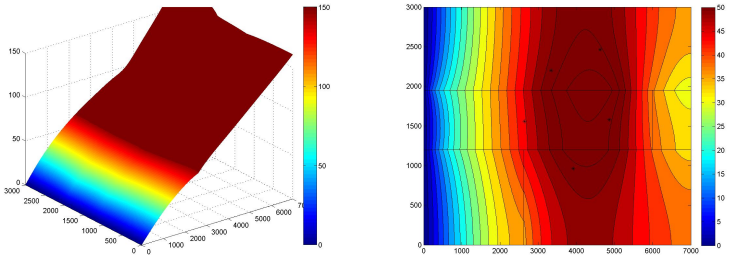
(α΄) u^1 (β΄) $|u^1 - U_{Alopex}|$



(γ΄) u^5 (δ΄) $|u^5 - U_{Alopex}|$



(ε΄) u^7 (στ΄) $|u^7 - U_{Alopex}|$



(ζ΄) u^{15} (η΄) $|u^{15} - U_{Alopex}|$

Σχήμα 9: Αριστερά οι λύσεις του προβλήματος με ROB, στις επαναλήψεις 2, 3, 5 και 7 με αρχική συνθήκη την $u^{(0)} = x/50 + ((y * (3000 - y)/2250000) * 20)$, $\lambda_{ij} = 1$ για τις οριζόντιες και κάθετες διεπαφές. Δεξιά οι απόλυτες διαφορές των λύσεων ROB από τη λύση του προβλήματος με ALOPEX - FENICS (KEO1).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επανάληψη (γωνίες πάνω στις διεπαφές) εξομαλύνεται στα επόμενα βήματα της μεθόδου, ωστόσο στο κέντρο το γενικού χωρίου εξακολουθεί να υπάρχει αρκετή διαφορά. Ο πειραματισμός με αρχικές συνθήκες, με διαφορετικές τιμές στις παραμέτρους της χαλάρωσης είναι αναγκαίος προκειμένου να κατανοήσουμε το πρόβλημα και να μπορέσουμε να παράγουμε ακριβέστερη λύση.

4 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της Δράσης 2.2, σύμφωνα με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:
Τεχνική Έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

Επιστημονικά άρθρα Στα πλαίσια της εν λόγω Δράσης παρήχθησαν οι εξής δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια και επιστημονικά περιοδικά:

- M. Vavalis, M. Mu, G. Sarailidis, Finite element simulations of window Josephson junctions, J Comp Applied Math, 236, pp3186-3197, 2012
- P. Tsompanopoulou, Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, 6th International Conference on Numerical Analysis(NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece. pp 260-265.
- A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis, An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems, International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), Rhodes, Greece, Sept. 23-29, 2015.

Σχετικές δημοσιεύσεις που είναι αποτέλεσμα της συνεργασίας μεταξύ των ερευνητικών ομάδων του έργου και παραδίδονται ως παραδοτέα άλλων δράσεων περιλαμβάνουν:

- Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method, 6th International Conferenceon Numerical Analysis (NUMAN2014), A.Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp167-173.
- IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs, A.Korfiati, N. Sfika, K. Daloukas, C. Alexakos, P. Tsompanopoulou, S.Likothanassis, The 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC 215), July 1-3, 2015, London, U.K.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain/Multi-physics Problems, A. Korfiati, S. Likothanassis, P. Alefragis, K. Daloukas, P. Tsompanopoulou, 13th International Conference of Numerical Analysis & Applied Mathematics, Sept 23-29, 2015, Rhodes. Greece.

Πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων:

- Προσθήκες σε πλατφόρμα FENICS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.
- Προσθήκες σε πλατφόρμα FENICS για την εύρεση των interface points σε μη κανονικές γεωμετρίες με χρήση των KD trees.
- Προσθήκες σε πλατφόρμα FENICS για τη δημιουργία γραφικών παραστάσεων των λύσεων στο αρχικό χωρίο του προβλήματος.

5 Συνεργασίες

Στα πλαίσια αυτής της Δράσης, συνεργάστηκαν μέλη από όλες τις ερευνητικές ομάδες με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας).
Έγιναν προσπάθειες υλοποίησης των ΜΔΧ μέσα σε μεθόδους Collocation (με την ΚΕΟ 1 - Πολυτεχνείο Κρήτης) για την επίλυση παραβολικών προβλημάτων με ασυνέχεια στην παράγωγο, σε πρόβλημα μοντέλο για το παράδειγμα της Ιατρικής. Δεν υπάρχουν άμεσα δημοσιεύσιμα αποτελέσματα.
Η ομάδα ΚΕΟ 2 συνεργάστηκε με την ομάδα ΚΕΟ 3 (Πανεπιστήμιο Πατρών) για τον έλεγχο και την επαλήθευση των μεθόδων ΜΔΧ για την επίλυση προβλημάτων με πολλαπλά χωρία και φυσικά μοντέλα με μεθόδους Πεπερασμένων Στοιχείων μέσα από την πλατφόρμα FENICS σε σειριακή, παράλληλη και ασύγχρονη εκδοχή τόσο για ελλειπτικά όσο και για παραβολικά προβλήματα. Τέλος, και οι τρεις ερευνητικές ομάδες συνεργάστηκαν προκειμένου να εφαρμοστούν ΜΔΧ στο πρόβλημα-εφαρμογή από την Περιβαλλοντική Μηχανική που αφορά στην προσομοίωση υπεράντλησης νερού σε περιοχή της Καλύμνου. Αποτελέσματα από αυτή την συνεργασία δεν είναι ακόμη δημοσιεύσιμα.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Κατά τη διάρκεια του έργου πραγματοποιήθηκε ανασκόπηση μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών χωριών και φυσικών μοντέλων με ΜΔΧ. Δύο συγκεκριμένες μέθοδοι (ROB και GEO) χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων μοντέλων. Υπήρξε σοβαρή προσπάθεια για την χρήση ΜΔΧ στα πραγματικά προβλήματα-εφαρμογές από την Ιατρική και

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (cloud)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (distrib)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (asynch)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO με Collocation	X	X	
Υλοποίηση Μεθόδου GEO - Κάλυμνος	X	X	X

Πίνακας 7: Συνεργασίες των τριών ερευνητικών ομάδων στα πλαίσια της Δράσης 2.2.

την Περιβαλλοντική Μηχανική. Είναι θέμα χρόνου να παραχθούν επιπλέον θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα για δημοσίευση αλλά και για παραπέρα μελέτη, τόσο σε προβλήματα μοντέλα όσο και σε πραγματικά προβλήματα.

7 Βιβλιογραφία

Αναφορές

[1] S. Likothanassis A. Korfiati, P. Tsompanopoulou. Serial and parallel implementation of an interface relaxation method. In *6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014)*, 2014.

[2] P. Giannoulopoulos A. Mantoglou, M. Papantoniou. Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms. *Journal of Hydrology*, 297:209—228, 2004.

[3] John E Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou, and YG Saridakis. Discontinuous hermite collocation and diagonally implicit rk3 for a brain tumour invasion model. In *Proceedings of the World Congress on Engineering*, volume 1, 2013.

[4] Ladislau Boeloeni, Dan C. Marinescu, John R. Rice, Panagiota Tsompanopoulou, and EA Vavalis. Agent based scientific simulation and modeling. *Concurrency - Practice and Experience*, 12(9):845–861, 2000.

[5] C Chalkias. Implementation of a distributed system for the solution of multidomain / multiphysics problems. Diploma Thesis, Dep. of Electrical and Computer Eng., Univ. of Thessaly, 2013.

[6] Tony F Chan and Tarek P Mathew. Domain decomposition algorithms. *Acta numerica*, 3:61–143, 1994.

[7] Tzvetan Todorov Drashansky. *An agent-based approach to building multidisciplinary problem solving environments*. PhD thesis, Citeseer, 1996.

[8] Wilhelm Heinrichs. Domain decomposition for fourth-order problems. *SIAM journal on numerical analysis*, 30(2):435–453, 1993.

[9] EN Houstis, AC Catlin, P Tsompanopoulou, D Gottfried, G Balakrishnan, K Su, and JR Rice. Gasturbnlab: a multidisciplinary problem solving environment for gas turbine engine design on a network of nonhomogeneous machines. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 149(1):83–100, 2002.

[10] David E Keyes and William D Gropp. A comparison of domain decomposition techniques for elliptic partial differential equations and their parallel implementation. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 8(2):s166–s202, 1987.

[11] David E Keyes, Lois C McInnes, Carol Woodward, William Gropp, Eric Myra, Michael Pernice, John Bell, Jed Brown, Alain Clo, Jeffrey Connors, et al. Multiphysics simulations: Challenges and opportunities. *International Journal of High Performance Computing Applications*, 27(1):4–83, 2013.

[12] Aigli Korfiati, Niki Sfika, Konstantis Daloukas, Christos Alexakos, Panagiota Tsompanopoulou, and Spiros Likothanassis. Iraas: A cloud implementation of an interface relaxation method for the solution of pdes. In *2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing, part of World Congress on Engineering*, 2015.

[13] Patrick Le Tallec, Yann Hervé De Roeck, and Marina Vidrascu. Domain decomposition methods for large linearly elliptic three-dimensional problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 34(1):93–117, 1991.

[14] Pierre-Louis Lions. On the schwarz alternating method. iii: a variant for nonoverlapping subdomains. In *Third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, volume 6, pages 202–223. SIAM Philadelphia, PA, 1990.

[15] Shahani Markus, Elias N. Houstis, Ann Christine Catlin, John R. Rice, Panagiota Tsompanopoulou, E Vavalis, D Gottfried, Ke Su,

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

and Ganesh Balakrishnan. An agent-based netcentric framework for multidisciplinary problem solving environments (mpse). *International Journal of Computational Engineering Science*, 1(01):33–60, 2000.

[16] John Michopoulos, Panagiota Tsompanopoulou, E Houstis, Charbel Farhat, Michel Lesoinne, J Rice, and Anupam Joshi. On a data-driven environment for multiphysics applications. *Future Generation Computer Systems*, 21(6):953–968, 2005.

[17] Mo Mu and John R Rice. Modeling with collaborating pde solvers: theory and practice. *Contemporary Mathematics*, 180:427–427, 1994.

[18] Ramesh Natarajan. Domain decomposition using spectral expansions of steklov-poincaré operators. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 16(2):470–495, 1995.

[19] John R Rice, P Tsompanopoulou, and E Vavalis. Sciagents tool: User's guide. 1998.

[20] John R Rice, EA Vavalis, and DAOQI Yang. Convergence analysis of a non-overlapping domain decomposition method for elliptic pdes. 1993.

[21] JR Rice, P Tsompanopoulou, and E Vavalis. Interface relaxation methods for elliptic differential equations. *Applied Numerical Mathematics*, 32(2):219–245, 2000.

[22] JR Rice, P Tsompanopoulou, and E Vavalis. Fine tuning interface relaxation methods for elliptic differential equations. *Applied numerical mathematics*, 43(4):459–481, 2002.

[23] Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas, and Panagiota Tsompanopoulou. Dynamic cloud resources allocation on multidomain/multiphysics problems. In *Future Internet of Things and Cloud (FiCloud), 2015 3rd International Conference on*, pages 31–37. IEEE, 2015.

[24] P Tsompanopoulou and E Vavalis. An experimental study of interface relaxation methods for composite elliptic differential equations. *Applied Mathematical Modelling*, 32(8):1620–1641, 2008.

[25] P Tsompanopoulou and E Vavalis. Analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 226(2):370–387, 2009.

[26] Chengen Wang. Insights from developing a multidisciplinary design and analysis environment. *Computers in Industry*, 65(4):786–795, 2014.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Γ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 2.3

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **3**
1.1 Συνοπτική παρουσίαση 3

2 Μεθοδολογία **4**

3 Μαθηματικό Υπόβαθρο **7**
3.0.1 Λύτες Στοχαστικών/Ντετερμινιστικών ελλειπτικών ΜΔΕ. . 7
3.0.2 Σχετικές μελέτες 9
3.1 Υλοποίηση και χρήση 10
3.2 Αριθμητικά πειράματα 13
3.2.1 Πειράματα 2-διαστάσεων 13
3.2.2 Πειράματα 3-διαστάσεων 15

4 Παραδοτέα **18**

5 Συνεργασίες **18**

6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις **20**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

1.1 Συνοπτική παρουσίαση

Σύμφωνα με το τεχνικό δελτίο του έργου η δράση της παρούσας έκθεσης συνοψίζεται ως εξής.

Τίτλος Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Σύντομη περιγραφή: Ανάλυση, ανάπτυξη και υλοποίηση υβριδικών μεθόδων, οι οποίες συνδυάζουν στοχαστικούς αλγορίθμους τύπου Monte Carlo και ντετερμινιστικούς αλγορίθμους διακριτοποίησης, για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ.

Παραδοτέα:

- 2.3.1 Τεχνική έκθεση
- 2.3.2 Δημοσίευση τουλάχιστον τριών (3) επιστημονικών άρθρων σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά ή/και πρακτικά διεθνών συνεδρίων.
- 2.3.3 Λογισμικό

Αναλυτικότερη περιγραφή: Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που θα αναπτυχθεί στοχεύει στην ανάπτυξη υβριδικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ οι οποίες θα αποτελούνται από τον συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo, για να κατατμήσει το αρχικό σύνθετο πρόβλημα ΜΔΕ σε ένα σύνολο πλήρως ανεξάρτητων μεταξύ τους υποπροβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων διαφορών) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων των υποπροβλημάτων. Αισιοδοξούμε ότι θα μπορέσουμε να δημιουργήσουμε ένα γενικό πλαίσιο για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων (και όχι μόνον) αλλά και ένα πρακτικό εργαλείο για την προσομοίωσης τους. Η υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, διότι, πέρα από τον εγγενή παραλληλισμό των στοχαστικών μεθόδων, τα εν λόγω σχήματα έχουν διάφορα επιπρόσθετα ελκυστικά χαρακτηριστικά όσο αφορά την δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα (multithreading, cluster, web services, κ.λ.π.). Η ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας (2η Ερευνητική Ομάδα) είναι η κύρια ομάδα εργασίας που θα υλοποιήσει το μεγαλύτερο μέρος της παρούσας δράσης, θα συγγράψει και θα δημοσιεύσει τα ερευνητικά αποτελέσματα, και θα συντάξει την σχετική Τεχνική Έκθεση για την περιγραφή των επιστημονικών δραστηριοτήτων και των ερευνητικών αποτελεσμάτων του έλαβαν χώρα στα πλαίσια της παρούσας δράσης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης περιλαμβάνει τις συνολικές δράσεις και αποτελέσματα της δράσης και είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε το κύριο υπόβαθρο και τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 το μαθηματικό υπόβαθρο και το σχετικό γενικό αλγόριθμο για το δικό μας στοχαστικό / ντετερμινιστικό πλαίσιο επίλυσης και το σύστημά μας και σχολιάζουμε εν συντομία τα χαρακτηριστικά τους. Τα ζητήματα εφαρμογής εξετάζονται στην υπο-ενότητα 3.1 τα οποία συνδυάζονται με τις λεπτομέρειες εγκατάστασης και χρήσης. Μια περίληψη των αριθμητικών πειραμάτων που πραγματοποιήθηκαν μπορούν να βρεθούν στην ενότητα 3.2.

Αναλυτική αναφορά στα παραδοτέα και στις συνεργασίες που αναπτύχθηκαν θα βρείτε στις παραγράφους 4 και 5 αντίστοιχα. Τα μελλοντικά επιστημονικά μας πλάνα παρουσιάζονται στην παράγραφο 6.

2 Μεθοδολογία

Στην παρούσα παράγραφο παρουσιάζουμε μια επισκόπηση των υφιστάμενων προσεγγίσεων για την αριθμητική επίλυση γραμμικών ελλειπτικών ΜΔΕ χρησιμοποιώντας μεθόδους βασισμένες στην μεθοδολογία Μόντε Κάρλο.

Στην αναφερόμενη δράση μελετούμε στοχαστικούς αριθμητικούς λύτες για ντετερμινιστικά ελλειπτικά προβλήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων(ΜΔΕ). Έχουμε επικεντρωθεί σε εκείνους που χαρακτηρίζονται από την multi-domain ή/και την multi-physics φύση τους. Ειδικότερα, μελετούμε είτε μεθόδους απλού τυχαίου περιπάτου σε σφαίρες ή συνέργειες των συμβατικών μεθόδων επίλυσης ντετερμινιστικών ΜΔΕ προβλημάτων και των παραδοσιακών πιθανολογικών Μόντε Κάρλο προσεγγίσεων. Οι βασικοί μας στόχοι είναι δύο. Ο πρώτος είναι να προσδιοριστεί με σαφήνεια το πλαίσιο και η πρακτική προσέγγιση όσον αφορά τη χρήση των ντετερμινιστικών συστατικών που οδηγούν σε αποτελεσματικούς αριθμητικούς λύτες για γραμμικές ντετερμινιστικές ΜΔΕ. Ο άλλος είναι ο σχεδιασμός και η υλοποίηση μίας απόδειξης λειτουργίας ενός υπολογιστικού πλαισίου που επιτρέπει τον πειραματισμό προκειμένου να διευκρινίσει τις δυνατότητες και τον προσδιορισμό των αναδυόμενων υπολογιστικών χαρακτηριστικών των προτεινόμενων προσεγγίσεων. Μια κατηγορία προβλημάτων σε δύο και τρεις διαστάσεις του χώρου μελετούνται πρώτα και τα πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζονται και συζητούνται. Δύο επιπλέον προβλήματα παρουσιάζονται στη συνέχεια, που είναι σημαντικά από την άποψη της μηχανικής και συγχρόνως αποτελούν πρόκληση από τη μαθηματική και αριθμητική άποψη.

Η μέθοδος Μόντε Κάρλο έχει τη δυνατότητα να παρέχει κατά προσέγγιση λύσεις σε μια ποικιλία μαθηματικών προβλημάτων, όχι κατ ’ανάγκην με πιθανο-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

λογικό περιεχόμενο ή δομή, εκτελώντας στατιστικά δειγματοληπτικά πειράματα. Περίπου ένας αιώνας έχει περάσει από την ανακάλυψη των μεθόδων οι οποίες βασιζόμενες στην έννοια του Μόντε Κάρλο παρέχουν αριθμητικές προσεγγίσεις για προβλήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων. Αυτές οι μέθοδοι παράγουν τυχαίους αριθμούς και με την παρατήρηση ορισμένων χαρακτηριστικών τους και της συμπεριφοράς τους είναι ικανά να υπολογίσουν προσεγγίσεις των λύσεων. Συγκεκριμένα, ήταν ο [43] ο οποίος πρώτος μελέτησε τη σχέση μεταξύ των στοχαστικών διαδικασιών και των παραβολικών διαφορικών εξισώσεων και ακολούθησε ο [15] που προτείνει αριθμητικές διαδικασίες για Ελλειπτικές ΜΔΕ, ενώ [34] ήταν οι πρώτοι που προσδιόρισαν αυτήν τη στοχαστική προσέγγιση δίνοντάς της ένα όνομα που παραπέμπει στις εγκαταστάσεις τυχερών παιχνιδιών στην πόλη του Μόντε Κάρλο και προτείνεται ως γενικός όρος για αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιούν δειγματοληψία τυχαίων αριθμών.

Από τότε οι Monte Carlo μέθοδοι έχουν χρησιμοποιηθεί συχνά και στην πραγματικότητα σε μεγάλο βαθμό και εξακολουθούν να χρησιμοποιούνται για πολλά σημαντικά προβλήματα. Για παράδειγμα, το Υπουργείο Ενέργειας των ΗΠΑ ισχυρίστηκε ότι οι MC προσομοιώσεις σταθερά καταναλώνουν έως και το ήμισυ των κύκλων υψηλής απόδοσης τους από την δημιουργία των υπερ-υπολογιστικών τους εγκαταστάσεων. Παρ ’όλα αυτά, δεν έχουν χρησιμοποιηθεί πολύ γραμμικές ΜΔΕ εφαρμογές. Γενικά θεωρούνται ως η έσχατη μέθοδος που είναι ιδανική είτε για προβλήματα υψηλών διαστάσεων είτε περίπλοκων γεωμετριών [31] . Είναι ενδιαφέρον να επισημάνουμε ότι αυτό που είπε ο Monte Carlo πρωτοπόρος Mark Kac *”Χρησιμοποιείτε τις MC μεθόδους, μέχρι να καταλάβετε το πρόβλημα”* πριν από μερικά χρόνια περιγράφει με ακρίβεια το πώς οι περισσότεροι από εμάς σήμερα βλέπουμε τις μεθόδους Monte Carlo.

Τα προβλήματα ΜΔΕ έχουν συσχετιστεί με την Monte Carlo με διάφορους τρόπους (βλ [27] για μια πρόσφατη έρευνα). Η διάσημη Feynman-–Kac φόρμουλα για παράδειγμα, δημιουργεί μια ενδιαφέρουσα σύνδεση μεταξύ των ΜΔΕ και των στοχαστικών διαδικασιών. Η μέθοδος Monte Carlo υπήρξε, και σε μεγάλο βαθμό εξακολουθεί να παραμένει η μόνη επιλογή για τον υπολογισμό διαφόρων μη-γραμμικών προβλημάτων, ενώ έχει αναγνωριστεί ως μια καλή επιλογή για πολλά άλλα υπολογιστικά δύσκολα μη γραμμικά προβλήματα. Επιπλέον φαίνεται να είναι μια φυσική επιλογή για κάθε διαφορική εξίσωση στην οποία ένας ή περισσότεροι από τους όρους είναι μια στοχαστική διαδικασία, που οδηγεί σε μία λύση που είναι και αυτή μία στοχαστική διαδικασία. Αυτό απεικονίζεται σαφώς από την πληθώρα των πολύ πρόσφατων ερευνητικών προσπαθειών που βασίζονται στην Monte Carlo για την αριθμητική επίλυση αυτών των εξισώσεων που είναι κοινώς γνωστές ως στοχαστικές διαφορικές εξισώσεις (βλέπε για παράδειγμα [45, 7] για χρονικά εξαρτημένα προβλήματα και [9, 33, 45, 8, 54] για ελλειπτικά προβλήματα).

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, ακόμη και θεμελιώδεις γραμμικές ΜΔΕ συνδέονται

στενά με τη στοχαστικότητα. Για παράδειγμα, είναι γνωστό ότι η διάχυση είναι στην πραγματικότητα μια μορφή της κίνησης Brown σε μικροσκοπική κλίμακα. Αυτό έδωσε αρκετό κίνητρο για τις διάφορες προσπάθειες για την ανάπτυξη και την προώθηση αριθμιτικών λυτών βασισμένων στην Monte Carlo για χρονικά εξαρτημένες ΜΔΕ (π.χ. [26, 14, 24, 20] και ιδίως [27]). Γραμμικά μη στοχαστικά ελλειπτικά προβλήματα οριακής τιμή είναι επίσης στενά συνδεδεμένη με την πιθανότητα (αυστηρή θεωρία μέτρου). Για παράδειγμα, τα ολοκληρώματα με αναφορά σε συγκεκριμένο μέτρο έχουν αναγνωριστεί ως λύσεις ορισμένων παραβολικών ή ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων [15] . Αξίζει να αναφέρουμε ότι υπάρχουν πολλές πρόσφατες ερευνητικές προσπάθειες που αφορούν πιθανολογικές ερμηνείες της αρμονικότητας και των θεμελιωδών Ελλειπτικών ΜΔΕ, χρησιμοποιώντας την κίνηση Brown και το στοχαστικό λογισμό (βλ [42] και αναφορά σ 'αυτό).

Στην εργασία αυτή περιορίζουμε την έρευνά μας στην αποτελεσματικότητα των μεθόδων Monte Carlo για την αριθμητική επίλυση γραμμικών Ελλειπτικών ΜΔΕ και επικεντρωνόμαστε στην εξίσωση Poisson. Πρέπει να τονιστεί ότι παρόλο που υπήρξε και υπάρχει προς το παρόν, σημαντική ερευνητική δραστηριότητα για το θέμα αυτό, οι προτεινόμενες μέθοδοι δεν έχουν προσελκύσει μέχρι στιγμής την αναμενόμενη προσοχή. Επιπλέον, μπορεί κανείς να βρει πολύ λίγα στοιχεία λογισμικού [1] που είναι διαθέσιμα στο κοινό και κατάλληλα για τη στήριξη του πειραματισμού που είναι απαραίτητος για την κατανόηση των χαρακτηριστικών και της ιδιοσυγκρασίας των προτεινόμενων μεθόδων και για να πεισθούν τόσο οι ερευνητές όσο και οι επαγγελματίες ότι μπορούν να χρησιμοποιηθούν αποτελεσματικά για προβλήματα του πραγματικού κόσμου, όπως για παράδειγμα αυτό που εξετάζεται στο [49].

Στην εργασία αυτή περιοριζόμαστε σε ορθογώνια πολλαπλών πεδίων δύο και τριών διαστάσεων και επικεντρωνόμαστε στην υλοποίηση ενός υπολογιστικού πλαισίου που επιτρέπει τον εύκολο πειραματισμό με υβριδικές μεθόδους που αποτελούνται κυρίως από ένα συνδυασμό δύο βημάτων:

- **Στοχαστική προεργασία:** Μία προσέγγιση περιπάτου σε σφαίρες που βασίζεται στην Monte Carlo, χρησιμοποιείται για τον διαχωρισμό του αρχικού προβλήματος ΜΔΕ σε ένα σύνολο ανεξάρτητων υπο-προβλημάτων ΜΔΕ.

- **Ντετερμινιστική επίλυση:** Γίνεται αριθμητική επίλυση του κάθε υπο-προβλήματος ανεξάρτητα μέσω επιλεγμένων συστημάτων πεπερασμένων στοιχείων.

[1] Αναζήτηση στην TOMS BibTeX βιβλιογραφία με την λέξη κλειδί "Μόντε Κάρλο" επιστρέφει μόλις 10 αποτελέσματα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3 Μαθηματικό Υπόβαθρο

Το υβριδικό μοντέλο που βασίζεται σε στοχαστικές-ντετερμινιστικές μεθόδους Μόντε Κάρλο και δεν είναι νέο. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, ο Courant [**?**] ήταν ο πρώτος που αναφέρει τη χρήση Στοχαστικών Μεθόδων για την επίλυση μη-στοχαστικών προβλημάτων. Παρ 'όλα αυτά, ήταν Muller [39] ο οποίος βασιζόμενος στην τότε απόρρητη έρευνα του Metropolis [34] πρότεινε για πρώτη φορά ένα συγκεκριμένο αριθμητικό σχήμα. Το έργο του συνέχισαν άλλοι (για παράδειγμα [19] [47] και[46].

Στις πρόσφατες προσπάθειες θα αναφέρουμε τις [53, 11, 16, 35, 36, 17] και ιδίως εκείνες της τελευταίας δεκαετίας [29, 32, 24, 21, 38, 37, 18, 40, 25, 13, 45, 50, 41, 51, 49, 52]. Η πρόσφατη αυτή εξαιρετική δουλειά έχει λάβει μέχρι στιγμής ελάχιστη προσοχή από την επιστημονική μας κοινότητα (π.χ. σύμφωνα με αναφορές στο Scopus.)

Αξίζει να αναφερθεί ότι (εκτός από λίγες εξαιρέσεις) το μεγαλύτερο μέρος της σχετικής εργασίας που αναφέραμε μέχρι τώρα δεν εστιάζει στην αποτελεσματική εφαρμογή των Monte Carlo λυτών γενικά και σε σύγχρονα συστήματα παράλληλης επεξεργασίας ειδικότερα. Είναι άξιο απορίας γιατί όλα αυτά τα διαθέσιμα πολυπύρηνα συστήματα δεν έχουν προσελκύσει τις Monte Carlo μεθόδους τουλάχιστον όσο αναμενόταν [2].

3.0.1 Λύτες Στοχαστικών/Ντετερμινιστικών ελλειπτικών ΜΔΕ.

Θεωρούμε το ακόλουθο ελλειπτικό πρόβλημα οριακής τιμής

$$Lu(x) = f(x) \quad x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d, \tag{1}$$

$$Bu(x) = g(x) \quad x \in \partial\mathcal{D}, \tag{2}$$

όπου L είναι ένας ελλειπτικός διαφορικός τελεστής, B τελεστής ορίου και $d \in \mathbb{N}$.

Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες κανονικότητας του κλειστού συνόλου $\mathcal{D}$, των τελεστές L και B και των δοθέντων συναρτήσεων $f(x)$ και $g(x)$ ικανοποιούνται. Αυτές οι συνθήκες διασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης $u(x)$ στο $C_2(\mathcal{D} \cap \partial\mathcal{D})$ του προβλήματος (1)–(2). Επιπλέον, υποθέτουμε ότι το πεδίο $\mathcal{D}$ αποτελείται από (ή μπορεί να διαιρεθεί σε) $\mathcal{N}_\mathcal{D}$ υποπεδία, π.χ.

$$\mathcal{D} = \cup_{\mu=1}^{\mathcal{N}_\mathcal{D}} \mathcal{D}_\mu \tag{3}$$

και ότι L_μ και f_μ είναι περιορισμοί των L και f στο $\mathcal{D}_\mu$ ενώ B_μ και g_μ είναι περιορισμοί των B και g στο $\partial\mathcal{D}_\mu \cap \partial\mathcal{D}$.

[2] url http://www.oxford-man.ox.ac.uk/gpuss

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ορίζουμε τελικά τη διεπαφή μεταξύ των δύο υποπεδίων $\mathcal{D}_\mu$ και $\mathcal{D}_\nu$ ως

$$\mathcal{I}_{\mu,\nu} = \partial\mathcal{D}_\mu \cap (\partial\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{D}_\nu) \subset \mathbb{R}^{d-1}, \quad \mu,\nu = 1,\ldots,\mathcal{N}_\mathcal{D}. \tag{4}$$

Υποθέτοντας $\mu \neq \nu$,. Προφανώς θεωρούμε μόνο τις διεπαφές για τις οποίες έχουμε ότι $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \neq \emptyset$.

Data: $i_1, i_2, \ldots, i_N$: τα id των υποπεδίων στα οποία επιθυμούμε να υπολογίσουμε τη λύση.
Result: $\tilde{u}_\mu$, $\mu = i_1, \ldots, i_N$: προσεγγίσεις των περιορισμών της ακριβής λύσης u στο υποπεδίο $\mathcal{D}_\mu$, $\mu = i_1, \ldots, i_N$.

`// PHASE I: E`
;
while $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \subset \cup_{j=1}^{N} \partial\mathcal{D}_{i_j}$ **do**
  Επιλογή σημείων ελέγχου $x_i \in \mathcal{I}_{\mu,\nu}, \;\; i = 1, 2, \ldots, M_{\mu,\nu}$;
  Εκτίμηση λύσης u στα σημεία ελέγχου x_i χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo;
  Υπολογισμός της παρεμβάλουσας $u^I_{\mu,\nu}$ του $u\mu, \nu$χρησιμοποιώντας τα σημεία ελέγχου x_i;
end

`// PHASE II: E`
;
for $j = 1, 2, \ldots, N$ **do**
  Λύση του προβλήματος ΜΔΕ::;
  $L_{i_j} u_{i_j}(x) = f_{i_j}(x) \;\; x \in \mathcal{D}_{i_j}$;
  $B_{i_j} u_{i_j}(x) = g_{i_j}(x) \;\; x \in \partial\mathcal{D}_{i_j} \cap \partial\mathcal{D}$;
  $L_{i_j} u_{i_j}(x) = h_{i_j}(x) \;\; x \in \mathcal{D}_{i_j}$; // $h_{i_j}(x)$ $u^I_{\mu,\nu}$s
end

Algorithm 1: The Generic Algorithm.

Είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι η ανωτέρω γενική μεθοδολογία που γίνεται ιδιαίτερα ελκυστική σε πολλές μορφές του πραγματικού κόσμου, για παράδειγμα, όταν οι περιορισμοί του ελλειπτικού τελεστή L δεν είναι οι ίδιοι σε όλα τα υποπεδία, όταν υπάρχουν ιδιόμορφα σημεία σε ορισμένους υποτομείς, όταν ο τομέας PDE $Omega$ είναι πολύπλοκος και μπορεί να απλοποιηθεί αν αποσυντεθεί σε υποτομείς ldots. Σε τέτοιες περιπτώσεις, είναι πολύ σημαντικό ότι ένας επιλέγει την πιο πρόσφορη τοπική λύση προσαρμοσμένη σε κάθε συγκεκριμένο υποπεδίο και τους περιορισμούς των τελεστών και των λειτουργιών σε αυτό. Επιπλέον, ο παραπάνω σχεδιασμός μας προσφέρει τη δυνατότητα να υπολογίσουμε τη λύση μόνο σε επιλεγμένους υποτομείς που έχουν ιδιαίτερη σημασία για εμάς.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.0.2 Σχετικές μελέτες

Οι στοχαστικές-ντετερμινιστικές υβριδικές μέθοδοι βασισμένες στη Μοντέλο Κάρλο δεν είναι κάτι νέο. Η πρωτότυπη ιδέα βρίσκεται στο[39]. Για τις μη-στοχαστικές γραμμικές ΜΔΕ όμως, ήταν μόνο πολύ πρόσφατα που προτάθηκαν τέτοιες μέθοδοι. Από όσο που μπορούμε να ξέρουμε, η ιδέα εμφανίστηκε για πρώτη φορά στο [22, 1] και μελετήθηκε επιπλέον στα [1, 2, 3, 5, 6, 4]. Στοιχεία του αλγορίθμου που περιγράφηκε παραπάνω έχουν εξεταστεί προηγουμένως. Συγκεκριμένα, ... Παρόμοια με τη δική μας δουλεία " A Hybrid Stochastic/Deterministic Method See PDE model (and beyond)" από διαφάνειες διαλέξεων του Mascari

$$Lu \equiv -u''(x) = f(x), \quad x \in \Omega \equiv [a, b] \tag{5}$$

with $a, b, \gamma \in R$, υπό τους ακόλουθους περιορισμούς ορίων

$$Bu(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega \equiv [a, b] \tag{6}$$

τα οποία, για την απλότητα στην παρουσίαση της μεθόδου θεωρούνται ότι είναι Dirichlet.

Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες κανονικότητας για την κλειστή περιοχή Ω και οι δεδομένες συναρτήσεις $b(x)$, c(x) ≤ 0, φ(x) και ψ(x) ικανοποιούνται.Αυτές οι συνθήκες που διασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης u(x) στο C2 (Ω) ∩ C(Ω) του προβλήματος (1),

Υποθέτοντας ότι Ω αποσυντίθεται σε p μη επικαλυπτόμενα υποπεδία $\Omega_i \equiv [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \ldots, p$ με $x_0 = a$, $x_p = b$ και $x_{i-1} < x_i \in \Omega$ για $i = 1, \ldots, p-1$. Δηλώνουμε το μέγεθος ενός υποπεδίου Ω_i με $\ell_i = x_i - x_{i-1}$ και τους περιορισμούς L, f και γ στο Ω_i από L_i, f_i, γ_i, αντίστοιχα. Επιπλέον υποθέτουμε ότι $\gamma(x) = \gamma_i$ για $x \in \Omega_i$, $i = 1, \ldots, p$, όπου τα γ_i's είναι πραγματικές σταθερές.

Η εφαρμογή μας μπορεί να λύσει την εξίσωση Poisson με συνοριακές συνθήκες Dirichlet. ([Σημείωση: Η ακόλουθη πρόταση είναι λάθος - είναι εκεί μόνο για να είναι υπό εξέταση] Τι περιορίζει αυτή τη μέθοδο για την επίλυση άλλων προβλημάτων πάρα πολύ, είναι η ανάγκη για τη λειτουργία του Green, που ταιριάζει στο πρόβλημα.)

Υποστηρίζει ένα αυθαίρετο αριθμό νημάτων. Για το multithreading χρησιμοποιούμε τη βιβλιοθήκη pthreads (σημείωση: έντυπο του προγράμματος επιτρέπει την εύκολη μετάβαση σε MPI).

Επιπλέον, οι τομείς που υποστηρίζονται είναι 2D και 3D υπερ-ορθογώνια. Εκείνοι μπορούν να αναλυθούν σε ένα M χ N αυθαίρετο πλέγμα μικρότερων υποτομέων(hyperrectangles).

Σε γενικές γραμμές, επιτυγχάνουμε την πιθανολογική αποσύνθεση τομέων ως εξής:

- **Υπολογισμός λύσης στα σημεία διεπαφής:** χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo που περιγράφεται στο [16] (υλοποιείται από εμάς - αυτό

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

το τμήμα μπορεί εύκολα να αποσπαστεί για να χρησιμοποιηθεί σε άλλες εφαρμογές), εκτιμούμε τις τοπικές λύσεις κατά μήκος των ορίων των νέων υποτομέων.

- **Λύσεις των διεπαφών:** παρεμβάλουμε τις εκτιμήσεις των τοπικών λύσεων (χρησιμοποιούμε την Sintef's Multilevel B-spline (MBA) [28] βιβλιοθήκη για το 3D και την Burkardt's splines βιβλιοθήκη για το 2D) και έτσι σχηματίζονται τα όρια των νέων υποπεδίων.
- **Υπολογισμός τοπικών λύσεων:**τώρα που τα όρια των υποπεδίων είναι γνωστά, λύνουμε το πρόβλημα για κάθε υποπεδίο χρησιμοποιώντας μία ντετερμινιστική μέθοδο. (Χρησιμοποιούμε την deal.II library).

3.1 Υλοποίηση και χρήση

Ξεκινάμε αυτή την ενότητα με την παρουσίαση της βασικής εφαρμογής[3] του αλγορίθμου που περιγράφεται παραπάνω.

Σημειώνουμε ότι η βασική υλοποίηση μπορεί να συνδυαστεί είτε με την CPU / GPU ή με τις υπηρεσίες web ή ένας συνδυασμός τους. Στο υπόλοιπο του παρόντος τμήματος για την απλότητα στην παρουσίαση, θα αναφερθούμε μόνον στην βασική υλοποίηση.

Αρχικά, ο χρήστης πρέπει να καθορίσει το πρόβλημα (προγραμματίζοντας τον στον πηγαίο κώδικα), π.χ, τη δεξιά πλευρά της Poisson εξίσωσης και των συνοριακών συνθηκών, το χωρίο, και τον επιθυμητό διαχωρισμό του χώρου (που χρησιμοποιείται για την παραλληλοποίηση).

Στη συνέχεια, ο χρήστης πρέπει να καθορίσει την ανάλυση των εκτιμήσεων Μόντε Κάρλο, δηλαδή, τον αριθμό των σημείων κατά μήκος μιας διεπαφής μεταξύ δύο υποτομέων όπου ο λύτης πρέπει να εκτιμήσει τη λύση χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του περιπάτου σε σφαίρες, τον αριθμό των (ανεξάρτητων) περιπάτων που θα χρησιμοποιηθούν και, τελικά, το μέσο όρο, έτσι ώστε να γίνει μια εκτίμηση, και το όριο ανοχής, δηλαδή την απόσταση που σηματοδοτεί αν ένα σημείο είναι αρκετά κοντά στο όριο έτσι ώστε ο λύτης να μπορεί να υποθέσει ότι η τιμήτης λύσης επί του σημείου αυτού είναι η ίδια με εκείνη στο όριο.

Ο λύτης τρέχει παράλληλα τους υπολογισμούς για κάθε ένα από τα σημεία της διασύνδεσης.[4] Η υλοποίησή μας βασίζεται στη μέθοδο περιπάτων σε σφαίρες [16]. Ας πούμε, ότι θέλουμε να εκτιμήσουμε το $u(x_0)$. Εάν s είναι η τρέχουσα εκτίμηση της λύσης, $B(x)$ είναι η μεγαλύτερη σφαίρα του τομέα εστιασμένη στο

[3] Περισσότερες πληροφορίες στο `https://github.com/mvavalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers`.

[4] Θα μπορούσαμε να παραλληλίσουμε περαιτέρω εκτελώντας όλους τους περιπάτους παράλληλα, όμως η επιτάχυνση δεν θα ήταν σημαντική, ειδικά αν λάβουμε υπόψη το κόστος υπολογισμού του λυτή των πεπερασμένων στοιχείων που πρόκειται να ακολουθήσουν.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

σημείοx, $q(y)$ είναι η δεξιά πλευρά του προβλήματος, και $a(d)$ είναι μια συνάρτηση που σχετίζεται με τη συνάρτηση του Green για τη λειτουργία του προβλήματος, που παίρνει ως είσοδο την ακτίνα του $B(x)$. Ένας περίπατος απαιτεί τους παρακάτω υπολογισμούς. βήμα i: ανάθεση το x_0 στο x; ανάθεση του 0 στο s; βήμα ii: εάν x είναι αρκετά κοντά στα όρια, πήγαινε στο βήμα v; βήμα iii: επίλεξε τυχαία ένα σημείο y μέσα στο $B(x)$, λαμβάνοντας υπόψη την πυκνότητα του $B(x)$ (περισσότερα σε αυτό στη συνέχεια); ανάθεση στο s, το άθροισμα της προηγούμενης τιμής του s, συν το γινόμενο του $q(y)$ πολλαπλασιαζόμενο με $a(d)$; βήμα iv: επίλεξε τυχαία ένα σημείο στην επιφάνεια του $B(x)$, ανάθεση του σημείου αυτού στο x; πήγαινε στο βήμα ii; βήμα v: επιστροφή s; Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται πολλές φορές, και ο μέσος όρος των εκτιμήσεων στο τέλος κάθε διαδικασίας χρησιμοποιείται ως τελική εκτίμηση.

Σημειώστε ότι το πρώτο βήμα, σε κάθε περίπατο επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας μία ημι-τυχαία ακολουθία (όχι εμφανής στον κώδικα στην Εικόνα ??). [εικασίες] το πρώτο βήμα επηρεάζει πολύ περισσότερο από ό, τι τα υπόλοιπα βήματα, την περιοχή όπου γίνεται ο περίπατος, ως εκ τούτου, χρησιμοποιώντας μία quasi-random ακολουθία για το πρώτο βήμα βοηθάει πολύ για να κάνουν μια πιο ομοιόμορφη δειγματοληψία, η οποία με τη σειρά του οδηγεί σε ταχύτερη σύγκλιση.

Ας εξετάσουμε τώρα πώς θα βρούμε τυχαία ένα σημείο y μέσα στο $B(x)$, σε σχέση με την πυκνότητα του $B(x)$ (`rand_update_y(x, y, d)`).[5] Για να υπολογιστεί το νέο y πρέπει να υπολογιστεί μια νέα ακτίνα και τη γωνία του φορέα για να προστεθεί στο φορέα που αντιστοιχεί στο σημείο x.

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της ακτίνας και η γωνία είναι: $\rho(r,\theta) = \frac{2r}{\pi d^2} \ln \frac{d}{r}$, και επειδή είναι ανεξάρτητη από τη γωνία, μπορούμε να επιλέξουμε μια γωνία. Τώρα πρέπει να βρούμε μία νέα PDF (ας πούμε $\rho(r)$) για την ακτίνα: $\rho(r) = \int_0^{2*pi} \rho(r,\theta)d\theta = 2\pi\rho(r,\theta) = \frac{4r}{d^2} \ln \frac{d}{r}$

Μπορούμε να επιλέξουμε μια ακτίνα χρησιμοποιώντας τη λειτουργία quantile του $\rho(r)$, π.χ., η αντίστροφη αθροιστική συνάρτηση κατανομής του). Ωστόσο, δεν μπορούμε να υπολογίσουμε την quantile συνάρτηση αναλυτικά, ως εκ τούτου, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο απόρριψης [44]. [6]

Σημειώστε ότι $max_x(PDF(x)) = 4/(e*d)$[7] Η μέθοδος απόρριψης θα λειτουργήσει ως εξής: βήμα i: ομοιόμορφη επιλογή ενός x_1 μέσα στο $(0,d)$, και ένα τυχαίο x_2 στο $(0, 4/(e*d))$. βήμα ii: έλεγχος εάν (x_1, x_2) είναι κάτω από την καμπύλη του PDF, το οποίο ισχύει εάν $2*pi*\rho(x1,\theta) < x2$. Εάν ισχύει, έχουμε

[5] Οι λεπτομέρειες αντιστοιχούν στην δισδιάστατη περίπτωση.

[6] [MATLAB script (to see the $\rho(r)$): $d = 1; r = 0 : .001 : d; y = (4/d^2) * (r * log(d) - r. * log(r)); plot(r, y);$] Η καμπανοειδής μορφή του $\rho(r)$ σημαίνει ότι η μέθοδος απόρριψη πρόκειται να είναι αποτελεσματική

[7] Έχουμε $(d/dx)(PDF(x)) = (4/d^2) * (lnd - lnr - 1) = 0 \Leftrightarrow lnr = lnd - lne \Leftrightarrow r = d/e$, that is $max_x(PDF(x)) = max(2 * pi * \rho(r,\theta)) = 2 * pi * \rho(d/e,\theta) = 4/(e*d)$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

βρει την ακτίνα x_1, διαφορετικά πήγαινε στο βήμα i.

Χρησιμοποιούμε quasi μόνο μία φορά για τον παραλληλισμό, αλλά δείτε [30]. Αυτή κάλεσε επανεξέταση των παράλληλων μεθόδων Monte Carlo παρέχει μια επισκόπηση του θέματος και κάποια νέα αποτελέσματα για ενιαίο υπολογισμό ιδιοτιμής.

Παρεμβολή Υπάρχει μια σημαντική διαφορά στην εφαρμογή μας, όσον αφορά την παρεμβολή μεταξύ των περιπτώσεων των 2-διαστάσεων και των 3-διαστάσεων. Στην περίπτωση των τριών διαστάσεων χρειαζόμαστε παρεμβολή 2-διαστάσεων. Δεδομένου ότι η τελευταία είναι σχετικά περίπλοκη από την άποψη του υπολογισμού κάνουμε precompute των παρεμβολών και τις τροφοδοτούμε στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων. Χρησιμοποιούμε Πολυεπίπεδη B-splines Βιβλιοθήκη Sintef του (MBA[8]). Συγκεκριμένα χρησιμοποιούμε [28]. Εδώ, επίσης, οι υπολογισμοί για κάθε παρεμβάλουσα εκτελούνται παράλληλα.

Στην περίπτωση των δύο διαστάσεων οι υπολογισμοί είναι σχετικά απλοί και έχουμε επιλέξει να μην γίνεται προεπεξεργασία των παρεμβολών. Αντ 'αυτού, έχουμε παράσχει στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων τις πληροφορίες που απαιτούνται για τον υπολογισμό των απαιτούμενων παρεμβολών επί τόπου. Για την παρεμβολή μίας διάστασης χρησιμοποιούμε την C ++ βιβλιοθήκη John Burkardt της spline.

Σαφώς,και στις δύο περιπτώσεις, τα σημεία που χρησιμοποιούνται για την παρεμβολή είναι αυτό που υπολογίστηκε στο προηγούμενο βήμα της Μόντε Κάρλο εκτιμήσης.

Πεπερασμένα Στοιχεία Το τελικό βήμα της διαδικασίας είναι η λύση του κάθε υποπροβλήματος (που αντιστοιχεί σε κάθε υπο-περιοχή) χρησιμοποιώντας ένα λύτη πεπερασμένων στοιχείων. Σαφώς, οι υπολογισμοί για κάθε υπο-πρόβλημα εκτελούνται παράλληλα.

Χρησιμοποιούμε την C++ βιβλιοθήκη deal.II[9]. Αυτή η πρόσφατα αναπτυχθήσα βιβλιοθήκη και ήδη ευρέως χρησιμοποιούμενη βιβλιοθήκη [10] προσφέρει προσαρμοστικούς λύτες πεπερασμένων στοιχείων υψηλής ποιότητας για την αριθμητική επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων.[10]

[8] `http://www.sintef.no/upload/IKT/9011/geometri/MBA/mba-1.1.tgz`

[9] `http://www.dealii.org/`

[10] Η C++ κλάση μας `LaplaceSolve` βασίζεται στην κλάση `LaplaceProblem`, που υλοποιήθηκε στο 4ο βήμα του tutorial, στο documentation της έκδοσης 6.1.0 της βιβλιοθήκης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.2 Αριθμητικά πειράματα

3.2.1 Πειράματα 2-διαστάσεων

Ξεκινάμε με την εξέταση του ορθογώνιου χώρου $\Omega \equiv [-1,1] \times [-1,1]$ της εξίσωσης Poisson

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y),\ \forall (x,y) \in \Omega, \tag{7}$$

όπου

$$f(x,y) = (1-\pi^2)\left(\sin(\pi x)\sinh(y) + 4\cosh(2x)\cos(2\pi y)\right), \tag{8}$$

υπό τις ακόλουθες συνοριακές συνθήκες Dirichlet

$$\begin{array}{ll} u(\pm 1, y) = & \cosh(\pm 2)\cos(2\pi y) \\ u(x, \pm 1) = & \sin(\pi x)\sinh(\pm 1) + \cosh(2x), \end{array} \quad \forall (x,y) \in \partial\Omega. \tag{9}$$

Η ακριβής λύση του παραπάνω προβλήματος δίνεται από

$$u(x,y) = \sin(\pi x)\sinh(y) + \cosh(2x)\cos(2\pi y). \tag{10}$$

και όπως απεικονίζεται στην εικόνα 3.2.1 έχει μάλλον έντονες διακυμάνσεις κατά μήκος και των δύο αξόνων που μας επιτρέπει να εξετάσουμε ποιοτικά την αποτελεσματικότητα του συστήματος μας. Για το σκοπό αυτό, θα αποσυντεθεί ο τομέας της ΜΔΕ Ω σε οκτώ μη επικαλυπτόμενους υποτομείς που ορίζονται από τις γραμμές διασύνδεσης σε $x_1 = 0$ and $y_1 = -0.5$, $y_2 = 0$ and $y_3 = 0.75$, λύνουμε τα υπο-προβλήματα ΜΔΕ που ορίζονται από τους υποτομείς $\Omega_{1,0}$, $\Omega_{0,1}$ και $\Omega_{2,1}$ και σχεδιάζουμε τις λύσεις που υπολογίστηκαν...

Σημειώνουμε εδώ ότι εκτός από τις λειτουργίες που ορίζουν το πρόβλημα ΜΔΕ (τη δεξιά πλευρά του ελλειπτικού τελεστή και των οριακών συνθηκών, και ίσως την πραγματική λύση εάν αυτή είναι γνωστή), ο χρήστης πρέπει να δώσει άλλες παραμέτρους όπως αυτές απεικονίζονται στην λίστα που ακολουθεί 1 η οποία είναι σύμφωνη με μια γραφική διεπαφή χρήστη που αναπτύσσουμε. Η περιγραφή αυτής της διασύνδεσης είναι πέρα από το πεδίο εφαρμογής του παρόντος εγγράφου.

Listing 1: Listing of the configuration file for the 2D model problem.

```
# ============================

# General Parameters
2  # Number of dimensions
4  # Maximum number of threads

1  # Dimension X length
1  # Dimension Y length
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

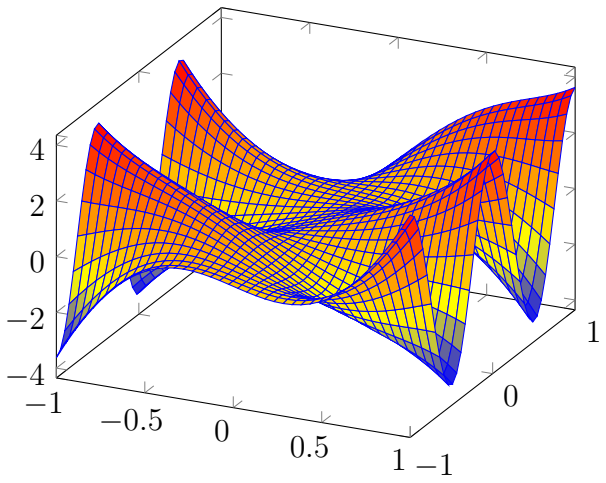
```
2  # Number of subdomains along dimension X
2  # Number of subdomains along dimension Y

# ============================

# Monte Carlo Parameters
1000          # Number of walks
.0000000001   # Boundary tolerance

# ============================

# Interpolation Parameters
3  # Number of nodes along dimension X
3  # Number of nodes along dimension Y

# ============================

# Conjugate Gradient Parameters
6  # laplace grid refine times
   # the parameters of solver_control()
```

Για την αριθμητική επίλυση των προαναφερθέντων υποπροβλήματα έχουμε βασισθεί σε μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων της βιβλιοθήκης deal.II με διαφορετικές στρατηγικές προσαρμογής βελτίωση (h, h και hp) βασιζόμενες σε δείκτες και λάθους με βάση τις τοπικές εκτιμήσεις σφάλματος. Στον Πίνακα 1 παρουσιάζονται τα εν λόγω διάφορα χαρακτηριστικά. Εικόνα 3.2.1 παρουσιάζει την ποιότητα της λύσης και την επίδραση του μηχανισμού βελτίωσης. Σας παρουσιάζουμε μόνο τα δεδομένα για συγκεκριμένα υπο-προβλήματα. Τα δεδομένα που σχετίζονται με τα υπόλοιπα είναι παρόμοια. Συγκεκριμένα, παρουσιάζονται στον y-άξονα την L2 νόρμα του σφάλματος και στον χ-άξονα το επίπεδο της βελτίωσης.

Πίνακας 1: Τα αριθμητικά χαρακτηριστικά των αριθμητικών μεθόδων.

cycle		0	1	2	3	4
cells		4	16	64	256	1024
Q1 elements	dofs	9	25	81	289	1089
	CG iterations	1	6	23	51	103
Q2 elements	dofs	25	81	289	1089	4225
	CG iterations	7	31	70	142	286

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 1: Πραγματική λύση του προβλήματος ΜΔΕ από(7)–(9).

3.2.2 Πειράματα 3-διαστάσεων

Εξετάζουμε το πρόβλημα ΜΔΕ που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα τροποποιώντας το ελαφρώς ως εξής.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = x + y + z \;\; \forall (x, y) \in \Omega \equiv [-1, 1]^3, \tag{11}$$

υπό τις ακόλουθες συνοριακές συνθήκες Dirichlet

$$u(x, y, z) = g(x, y, z) \;\; \forall (x, y) \in \partial\Omega, \tag{12}$$

όπου η συνάρτηση της δεξιάς πλευράς g επιλέγεται με τέτοιο τρόπο ώστε η λύση του παραπάνω προβλήματος (11)–(12) να δίνεται από την εξίσωση

$$u(x, y, z) = \exp(\sqrt{2}\pi x)\sin(\pi(y + z)) + \frac{1}{6}\left(x^3 + y^3 + z^3\right). \tag{13}$$

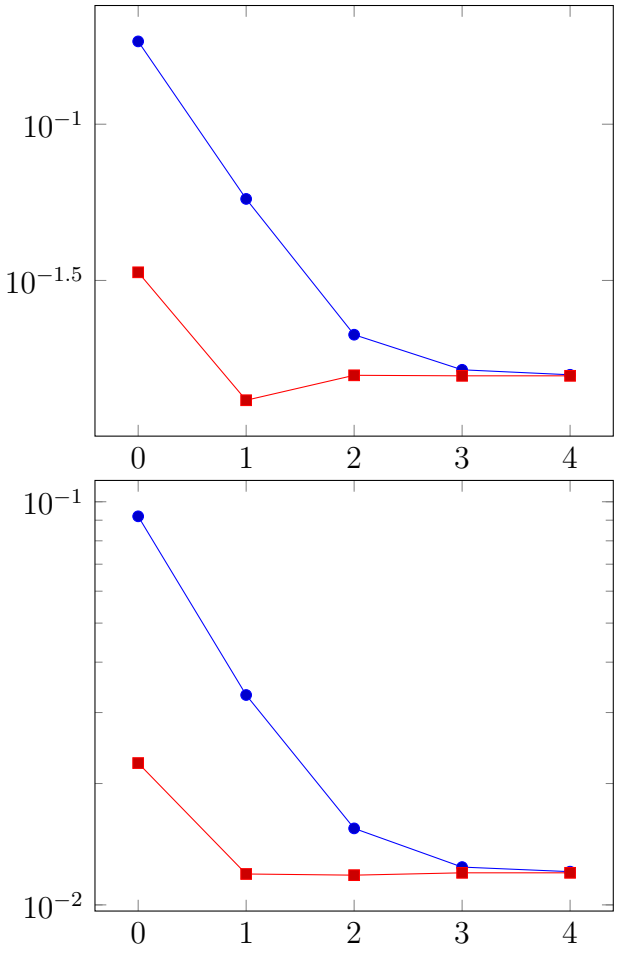
και απεικονίζεται στην εικόνα 3.

Εκτός από τις λειτουργίες που ορίζουν το ίδιο το πρόβλημα χρειαζόμαστε, όπως στην περίπτωση των 2 διαστάσεων να καθορίσουμε διάφορες παραμέτρους. Το σχετικό αρχείο ρυθμίσεων για το πείραμά μας δίνεται παρακάτω 2. Αξίζει να επισημανθεί η ομοιότητα των δύο αρχείων ρυθμίσεων για τις 2D και 3D περιπτώσεις (καταχωρίσεις 1 και 2 αντίστοιχα).

Η δόμηση του αρχείου ρυθμίσεων πρέπει να ακολουθεί τη δόμηση του gui.

Listing 2: Listing of the configuration file for the 3D model problem.

```
# ============================
```

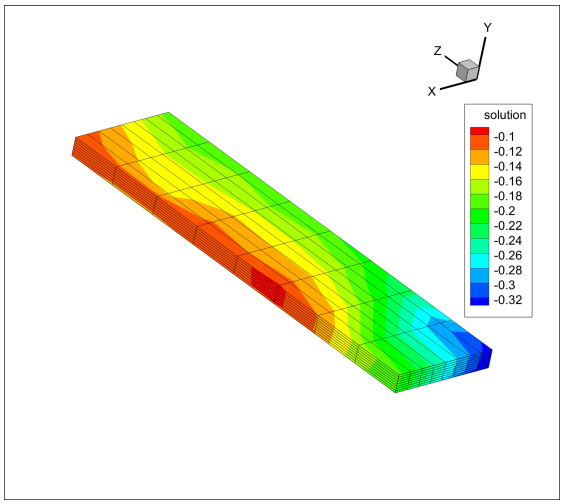


Σχήμα 2: L2 σφάλμα στο χωρίο $\Omega_{0,1}$ σαν συνάρτηση του επιπέδου βελτίωσης για Q1 (άνω γράφημα) και Q2 κάτω γράφημα).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
# General Parameters
3  # Number of dimensions
4  # Maximum number of threads

1  # Dimension X length
1  # Dimension Y length
1  # Dimension Z length

2  # Number of subdomains along dimension X
2  # Number of subdomains along dimension Y
2  # Number of subdomains along dimension Z

# ============================

# Monte Carlo Parameters
1000          # Number of walks
.0000000001   # Boundary tolerance

# ============================

# Interpolation Parameters
2  # Number of nodes along dimension Y
   #      (on the YZ planes)
2  # Number of nodes along dimension Z
   #      (on the YZ planes)

2  # Number of nodes along dimension X
   #      (on the XZ planes)
2  # Number of nodes along dimension Z
   #      (on the XZ planes)

2  # Number of nodes along dimension X
   #      (on the XY planes)
2  # Number of nodes along dimension Y
   #      (on the XY planes)

7  # Number of levels in the hierarchical
   # construction (see MBA::MBAalg() of
   # Multilevel B-spline (MBA) library)

# ============================

# Conjugate Gradient Parameters
6  # laplace grid refine times
   # the params of solver_control()
```

Σε μια παρόμοια περίπτωση με αυτή των 2-διαστάσεων αποσυνθέτουμε τον τομέα Ω σε 16 μη επικαλυπτόμενους υποτομείς που ορίζονται από τα επίπεδα



Σχήμα 3: Η υπολογησθήσα λύση του προβλήματος ΜΔΕ όπως αυτό ορίζεται στα (11)–(12).

intreface $x_1 = 0$ and $y_1 = -0.5$, $y_2 = 0$, $y_3 = 0.75$ και $z_1 = -0.2$. ...

4 Παραδοτέα

Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση Το παρόν κείμενο.

Παραδοτέο 2.3.2 Δημοσίευση τουλάχιστον τριών (3) επιστημονικών άρθρων σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά ή/και πρακτικά διεθνών συνεδρίων
Οι δραστηριότητες της δράσης 2.3 έχουν παρουσιασθεί σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια και έχουν δημοσιευτεί σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά.

Παραδοτέο 2.3.3 Λογισμικό Βρίσκεται πρωτίστως στον ιστοχώρο `https://github.com/mvavalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers` και δευτερευόντως (υλοποίηση στην πλατφόρμα και ?παράλληλες υλοποιήσεις) στον ιστοχώρο `https://github.com/mvavalis/multidomain_multiphysics` και έχει ήδη αξιοποιηθεί από τις ομάδες εργασίας του έργου και όχι μόνον.

5 Συνεργασίες

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στα πλαίσια των ερευνητικών μας δραστηριοτήτων της δράσης 2.3 μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας έχει σε ουσιαστικό επίπεδο συνεργαστεί ερευνητικά με μέλη

Εσωτερικές συνεργασίες

- Πολύπλευρη συνεργασία με μέλη της ομάδας εργασίας του Πολυτεχνείου Κρήτης.
- Μονόπλευρη συνεργασία με μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Πάτρας.

Εξωτερικές συνεργασίες Με τους εξής συναδέλφους και τις αντίστοιχες επιστημονικές ομάδες:

- Γεώργιο Ζουράρη, Αναπληρωτή Καθηγητή του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Κρήτης τόσο δια ζώσης στο Ηράκλειο όσο και ηλεκτρονικά μέσω πολλών και εκτενών συνομιλιών (ηλ. ταχυδρομείο, τηλέφωνο και σκάιπ). Η συνεργασία αφορούσε, χωρίς να περιορίζεται, θέματα αξιολόγησης μοντελοποίησης με ΜΔΕ και ιδιαίτερα θέματα που άπτονται την σύγκλιση και την εκτίμηση σφάλματος κλασσικών στοχαστικών αριθμητικών μεθόδων που βασίζονται σε τεχνικές Μόντε Κάρλο.
- Martin Simon καθηγητή του Johannes Gutenberg-Universität Mainz και Sylvain Maire καθηγητή του Université de Toulon, La Garde, τόσο δια ζώσης, κατά την διάρκεια του συνεδρίου Eleventh International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, όσο και ηλεκτρονικά (ηλ. ταχυδρομείο) μέσω πολλών και εκτενών συνομιλιών. Η συνεργασία αφορούσε, χωρίς να περιορίζεται, θέματα ανάπτυξης μεθόδων τυχαίων περιπάτων σε σφαίρες για την αριθμητική επίλυση γενικών προβλημάτων γενικότερα αλλά και των δύο προβλημάτων μοντέλων (Διάδοση πρωτογενών καρκινικών όγκων εγκεφάλου (γλοίωμα/gliomas) και Υφαλμύριση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης) της δράσης 4.2 του έργου.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η συνεργασία με τους παραπάνω αναφερόμενους εξωτερικούς συνεργάτες δεν έχουν προς το παρόν καταλήξει σε δημοσιεύεις. Με βάση όμως τα προκαταρκτικά αποτελέσματά μας διαφαίνεται ότι σύντομα αυτά θα συγκεκριμενοποιηθούν σε σημαντικά ερευνητικά αποτελέσματα ιδιαίτερα αναφορικά με την εφαρμογή των μοντέλων Υφαλμύριση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης της δράσης 4.2?? του έργου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

Είναι πεποίθησή μας ότι το προτεινόμενο και υλοποιημένο πλαίσιο προωθεί μια ενδιαφέρουσα νέα αντίληψη για την επίλυση ντετερμινιστικών ΜΔΕ και υποστηρίζει όχι μόνο τον πειραματισμό, αλλά έχει επίσης τη δυνατότητα να αποτελέσει ένα πρακτικό εργαλείο.

Στόχος μας είναι να αυξηθεί η διαίσθηση μας σχετικά με τον προτεινόμενο αλγόριθμο, και όχι να προσπαθήσουμε να δώσουμε νέα αποτελέσματα ή ακόμη και να παρέχουμε ένα υπολογιστικό εργαλείο για προβλήματα του πραγματικού κόσμου.

Μπορεί να επεκταθεί σε πιο γενικές χρήσεις [53] ενδεχομένως με ανωμαλίες [21] φορείς της ανώτερης τάξης [23, 13] αντιμετώπιση Neumman ή μικτές συνοριακές συνθήκες [48, 50, 51] μη ορθογώνιες περιοχές και σχεδόν σε κάθε πρόβλημα με τη γνωστή λειτουργία Green.

Η επέκταση της εργασίας μας σε προβλήματα εξαρτημένα από το χρόνο φαίνεται ότι δεν είναι δύσκολη. Η αισιοδοξία μας πηγάζει από σχετικές προσπάθειες που έχουν ήδη κάνει την εμφάνισή τους στη βιβλιογραφία (βλ [14, 49, 20]) ή άλλες που έχουν αρχίσει να αναδύονται [12].

Επιπλέον, η υλοποίηση Monte Carlo λυτών υψηλής απόδοσης στις σύγχρονες αρχιτεκτονικές και τις αναδυόμενες υπολογιστικές πλατφόρμες (π.χ. συστήματα πολλαπλών πυρήνων, GPUs και η συνεχής ροή των υπολογιστών έχει ήδη ξεκινήσει και παρουσιάζεται σε άλλες ενότητες του έργου.

Αναφορές

[1] J. Acebrón, M. Busico, P. Lanucara, and R. Spigler. Probabilistically induced domain decomposition methods for elliptic boundary-value problems. *Journal of Computational Physics*, 210(2):421–438, 2005.

[2] J. Acebrón, M. Busico, P. Lanucara, and R. Spigler. Domain decomposition solution of elliptic boundary-value problems via Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 27(2):440–457, 2006.

[3] J. Acebrón, R. Durán, R. Rico, and R. Spigler. A new domain decomposition approach suited for grid computing. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4699 LNCS:744–753, 2007.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[4] J. Acebrón, A. Rodríguez-Rozas, and Spigler R. Domain decomposition solution of nonlinear two-dimensional parabolic problems by random trees. *Journal of Computational Physics*, 228(15):5574–5591, 2009.

[5] J. Acebrón and J.A. Spigler. A fully scalable parallel algorithm for solving elliptic partial differential equations. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4641 LNCS:727–736, 2007.

[6] J. Acebrón and R. Spigler. Scalability and performance analysis of a probabilistic domain decomposition method. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4967 LNCS:1257–1264, 2008.

[7] C. Alves and A. Cruzeiro. Monte Carlo simulation of stochastic differential systems - a geometrical approach. *Stochastic Processes and their Applications*, 118(3):346–367, 2008.

[8] I. Babuska, F. Nobile, and R. Tempone. A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45(3):1005–1034, 2007.

[9] I. Babuska, R. Tempone, and G. E. Zouraris. Solving elliptic boundary value problems with uncertain coefficients by the finite element method: The stochastic formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(12-16):1251–1294, 2005.

[10] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II—A general-purpose object-oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4):24–??, 2007.

[11] A. Bignami and E. Cupini. Monte Carlo method for finite difference equations of elliptic type in a multiregion domain. *J. Comput. Appl. Math.*, 8(2):87–92, 1982.

[12] Alexander Bihlo, Ronald D. Haynes, and Emily J. Walsh. Stochastic domain decomposition for time dependent adaptive mesh generation. *J. Math. Study*, 48(2):106–124, 2015.

[13] F. M. Buchmann and W. P. Petersen. An exit probability approach to solving high dimensional dirichlet problems. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 28(3):1153–1166, 2006.

[14] J. Carlsson. A backward Monte Carlo method for solving parabolic partial differential equations. *arXiv:math/0010118v1*, 2000.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[15] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. $\ddot{U}$ber die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100:32–74, 1928.

[16] J. M. DeLaurentis and L. A. Romero. A Monte Carlo method for Poisson's equation. *J. Comput. Phys.*, 90(1):123–140, 1990.

[17] I. T. Dimov and T. V. Gurov. Estimates of the computational complexity of iterative Monte Carlo algorithm based on Green's function approach. *Mathematics and Computers in Simulation*, 47(2-5):183–199, 1998.

[18] I. T. Dimov and R. Y. Papancheva. Green's function Monte Carlo algorithms for elliptic problems. *Mathematics and Computers in Simulation*, 63(6):587–604, 2003.

[19] K. Edwards and A. Hogg. Methods of improving analogue Monte Carlo solutions of elliptic partial differential equations. 1:664–673, 1967.

[20] R. Farnoosh and M. Ebrahimi. Monte Carlo method via a numerical algorithm to solve a parabolic problem. *Applied Mathematics and Computation*, 190(2):1593–1601, 2007.

[21] J. Given and C. Hwang. Edge distribution method for solving elliptic boundary value problems with boundary singularities. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 68(4 2):461281–461286, 2003.

[22] E. Gobet and S. Maire. Sequential Monte Carlo domain decomposition for the Poisson equation. In *17th IMACS World Congress, Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation*, July 2005.

[23] K. Gopalsamy and B. Aggarwala. Monte Carlo methods for some fourth order partial differential equations. *Z Angew Math Mech*, 50(12):759–767, 1970.

[24] M. Griebel and M. A. Schweitzer. A particle-partition of unity method for the solution of elliptic, parabolic, and hyperbolic PDEs. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 22(3):853–890, 2001.

[25] S. Heinrich. The randomized information complexity of elliptic PDE. *Journal of Complexity*, 22(2):220–249, 2006.

[26] S. Hoshino and K. Ichida. Solution of partial differential equations by a modified random walk. *Numerische Mathematik*, 18(1):61–72, 1971.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[27] B. Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis. *Introduction to Monte Carlo Methods for Transport and Diffusion Equations*. 0xford University Press, 2003. Translated by A. Craig and F. Craig.

[28] S. Lee, G. Wolberg, and S. Shin. Scattered data interpolation with multilevel B-splines. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 3(3):228–244, 1997. cited By (since 1996) 175.

[29] R. N. Makarov. Solution of boundary value problems for nonlinear elliptic equations by the Monte Carlo method. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 14(5):453–467, 1999.

[30] M. Mascagni. Deterministic Monte Carlo methods and parallelism. volume Sourcebook on Parallel Computing, pages 249–258, 2003.

[31] M. Mascagni and C. Hwang. ϵ-Shell error analysis for "Walk On Spheres" algorithms. *Mathematics and Computers in Simulation*, 63(2):93–104, 2003.

[32] M. Mascagni, A. Karaivanova, and Y. Li. A quasi-Monte Carlo method for elliptic partial differential equations. *Monte Carlo Methods and Applications*, 7:283–294, 2001.

[33] H. G. Matthies and A. Keese. Galerkin methods for linear and nonlinear elliptic stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(12-16):1295–1331, 2005.

[34] N. Metropolis and S. Ulam. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44:335–341, 1949.

[35] G. A. Mikhailov. Recurrent formulae and the Bellman principle in the Monte Carlo method. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 9(3):281–289, 1994.

[36] G. A. Mikhailov. Solving the Dirichlet problem for nonlinear elliptic equations by the Monte Carlo method. *Siberian Mathematical Journal*, 35(5):967–975, 1994.

[37] G. A. Mikhailov and V. L. Lukinov. Probability representations and the Monte Carlo method for solving equations with powers of elliptic operators. *Doklady Mathematics*, 67(3):423–425, 2003.

[38] G. Milstein and M. Tretyakov. The simplest random walks for the Dirichlet problem. *Theory of Probability and its Applications*, 47(1):53–68, 2003.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[39] M.E. Muller. Some continuous Monte Carlo methods for the Dirichlet problem. *The Annals of Mathematical Statistics*, 27(3):569–589, 1956.

[40] R. J. Papancheva, I. T. Dimov, and T. V. Gurov. *A new class of grid-free Monte Carlo algorithms for elliptic boundary value problems*, volume 2542, pages 132–139. 2003.

[41] R. Y. Papancheva. *Parallel realization of grid-free Monte Carlo algorithm for boundary value problems*, volume 3743 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 181–188. Springer, 2006.

[42] N. Privault. Potential theory in classical probability. In U. Franz and M. Schurmann, editors, *Quantum Potential Theory*, volume 4310 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 3–59. Springer, 2008.

[43] L.J.W.S. Rayleigh. On James Bernoulli's theorem in probabilities. *Philos. Mag.*, 47:246–251, 1899.

[44] Christian P. Robert and George Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 2005.

[45] L. Roman and M. Sarkis. Stochastic Galerkin method for elliptic SPDEs: A white noise approach. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, 6(4):941–955, 2006.

[46] J. Sacadura and A. Al-Abed. Analysis of time-dependent cylindrical problems using Monte Carlo. *ASME, Transactions, Journal of Heat Transfer (ISSN 0022-1481)*, 105:931–933, 1983.

[47] E. Sadeh and M.A. Franklin. Monte Carlo solution of partial differential equations by special purpose digital computer. *IEEE Transactions on Computers*, 23(4):389–397, 1974.

[48] M. Sadiku and K. Gu. New Monte Carlo method for -Neumann problems. pages 92–95, 1996.

[49] M.N.O. Sadiku, C.M. Akujuobi, S.M. Musa, and S.R. Nelatury. Analysis of time-dependent cylindrical problems using Monte Carlo. *Microwave and Optical Technology Letters*, 49(10):2571–2573, 2007.

[50] N. Simonov. Monte Carlo methods for solving elliptic equations with boundary conditions containing the normal derivative. *Doklady Mathematics*, 74(2):656–659, 2006.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[51] N. Simonov. Random walks for solving boundary-value problems with flux conditions. volume 4310 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 181–188. Springer, 2007.

[52] B. Vajargah and K. Vajargah. Monte Carlo method for finding the solution of Dirichlet partial differential equations. *Applied Mathematical Sciences*, 1(10):453–462, 2007.

[53] J. Vrbik. Monte Carlo simulation of the general elliptic operator. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 20(3):2693–2697, 1987.

[54] X. Wan and G. Karniadakis. Solving elliptic problems with non-Gaussian spatially-dependent random coefficients. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(21–26):1985–1995, 2009. Advances in Simulation-Based Engineering Sciences - Honoring J. Tinsley Oden.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Listing 3: Random walks on spheres implementation

```
/**
 * @nof_walks: this first argument of the function corresponds to the
 *             number of walks we are willing to make.
 * @x_start: this second argument is the point whereat we want the v
 *          alue of  the solution function.
 * The algorithm estimates the value of the solution function at
 * @x_start byaveraging the estimates of the @nof_walks different
 * walks on spheres.
 * Some additional functions are used in the following:
 *   calc_sphere_rad(x) returns the radius of the largest sphere, i
 *                      n the domain,  that is centered at @x
 *   f(x) returns the value of the solution function on @x close
 *                      to the boundary
 *   q(x) returns the value of the right hand side on @x
 */
double mc_estimate(int nof_walks, double *x_start)
{
  int i, j;
  double msol_est; //mean estimate of the solution

  msol_est = .0; //initialize msol_est
  for (i=0; i<nof_walks; i++) {
    double x[2]; //randomly chosen point on the boundary
                 //(random distribution: uniform)
    double y[2]; //randomly chosen point inside the sphere
          //(random distribution: dictated by the Green function)
    double sol_est; //current estimate of the solution
    double d; //radius of the sphere at hand

    x[0] = x_start[0]; //initialize x
    x[1] = x_start[1];
    sol_est = .0; //initialize sol_est

    while ((d = calc_sphere_rad(x)) > btol) { //i.e., x is not
                        // close to the boundary
      rand_update_y(x, y, d); //update y
      sol_est += (d*d/4.)*q(y);

      rand_update_x(x, d); //update x
    }

    sol_est += f(x);

    msol_est += sol_est/nof_walks;
  }

  return msol_est;
}
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Δ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 2.4

Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **3**
1.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις $1+1$ διαστάσεις 3
1.2 Εισαγωγή στις δύο χωρικές διαστάσεις και σε μη-γραμμικά προβλήματα 4

2 Μεθοδολογία **5**
2.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις $1+1$ διαστάσεις 5
2.1.1 Το Πρόβλημα Μοντέλο 5
2.1.2 Χρονικοί Μετασχηματισμοί 7
2.2 Μέθοδος Φωκά 10
2.2.1 Ολική Συνθήκη 10
2.2.2 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης 12
2.2.3 Αριθμητική Ολοκλήρωση 16

3 Αποτελέσματα **19**
3.0.1 Μοντέλα Ραδιοθεραπείας / Ακτινοθεραπείας 19
3.0.2 Αριθμητικά αποτελέσματα 21

4 Παραδοτέα **27**

5 Συνεργασίες **28**

6 Μελλοντικές Δράσεις **28**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί η μελέτη και προσαρμογή της μαθηματικής μεθόδου μετασχηματισμού-Φωκά για την αναλυτική επίλυση σύνθετων εξελικτικών προβλημάτων αιχμής (π.χ. πρόβλημα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου), τα οποία χαρακτηρίζονται από ασυνεχείς συντελεστές και περιγράφονται από προβλήματα πολλαπλών πεδίων, με στόχο την περιγραφή της λύσης σε κλειστή μορφή σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή χωρίς να απαιτείται η γνώση της λύσης σε οιανδήποτε άλλες ενδιάμεσες χρονικές στιγμές.

Στην κατεύθυνση αυτή, τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα που παρήχθησαν κατά τη διάρκεια του έργου αναφέρονται στην ανάπτυξη, σε κλειστή μορφή, της λύσης γραμμικών εξελικτικών προβλημάτων με χρονικές και χωρικές ασυνέχειες στις 1+1 διαστάσεις. Παράλληλα, έγιναν βήματα από συνεργαζόμενες ερευνητικές ομάδες για την επέκταση του νέου φορμαλισμού στις δύο χωρικές διαστάσεις, μέσω της μελέτης της γραμμικής εξίσωσης της θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις με πλάγιες Neumann συνοριακές συνθήκες. Πρόσφατα ξεκίνησε και η μελέτη μη-γραμμικών προβλημάτων με την παραγωγή αποτελεσμάτων αναφορικά με την γραμμική και μη γραμμική ΜΔΕ του Schrödinger στις 1+1 διαστάσεις με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev.

1.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις $1+1$ διαστάσεις

Μοντέλα εξελικτικών προβλημάτων αιχμής, που περιγράφουν τη συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων στο εγκέφαλο, απετέλεσαν το ουσιαστικό κίνητρο και τη βάση για την επέκταση και μελέτη της καινοτόμου μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά. Τα μοντέλα αυτά περιγράφονται με γραμμικά και μη-γραμμικά παραβολικά προβλήματα αρχικών-συνοριακών συνθηκών πολλαπλών πεδίων (ΠΑΣΣΠΠ), τύπου διάχυσης-αντίδρασης, τα οποία χαρακτηρίζονται από:

- Χωρικές ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης για να περιγράψουν την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού
- Χρονικές ασυνέχειες του συντελεστή επαύξησης (proliferation) για να περιγράψουν την εφαρμογή πρωτοκόλλων θεραπείας.

Για την επέκταση και προσαρμογή του γνωστού φορμαλισμού της μεθόδου Φωκά από ομοιογενή ανοικτά χωρία σε ανομοιογενή κλειστά χωρία χώρου-χρόνου ακολουθήσαμε τα παρακάτω γενικά αλγοριθμικά βήματα:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Διακριτοποίηση του ολικού χωρίου σε υποχωρία χρόνου-χώρου στα οποία η λύση του προβλήματος είναι αναλυτική συνάρτηση.
- Παραγωγή κατάλληλων συνοριακών συνθηκών και συνθηκών διεπαφής για κάθε υποχωρίο και εφαρμογή κατάλληλων μετασχηματισμών με αλλαγή μεταβλητών για την απλοποίηση του προβλήματος.
- Παραγωγή της λύσης του προβλήματος σε κλειστή μορφή σε κάθε υποχωρίο η οποία εξαρτάται από άγνωστες συνοριακές ποσότητες διεπαφής.
- Χρήση των ολικών συνθηκών για την παραγωγή γραμμικού αλγεβρικού συστήματος και καθορισμό των άγνωστων συνοριακών ποσοτήτων στις διεπαφές.
- Εφαρμογή τεχνικών επανέναρξης με νέες αρχικές συνθήκες, για προβλήματα με ασυνέχειες στο χρόνο.
- Προσέγγιση της αναλυτικής λύσης με αριθμητικές μεθόδους σε υπερβολικές καμπύλες.

1.2 Εισαγωγή στις δύο χωρικές διαστάσεις και σε μη-γραμμικά προβλήματα

Στη παράγραφο αυτή παραθέτουμε μία περίληψη σχετικών ερευνητικών αποτελεσμάτων συνεργαζόμενων ομάδων στη κατεύθυνση της επέκτασης του φορμαλισμού στις δύο διαστάσεις καθώς και της χρήσης του μετασχηματισμού Φωκά σε μη γραμμικά προβλήματα. Συγκεκριμένα:

- Η μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά χρησιμοποιείται για την επίλυση, σε κλειστή μορφή, της εξίσωσης θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις (στο ανοικτό θετικό τέταρτο του επιπέδου) με μη- διαχωρίσιμες πλάγιες-Neaumann συνοριακές συνθήκες. Σημειώνεται ότι μη- διαχωρίσιμα ΠΑΣΣ δεν είναι δυνατόν να αντιμετωπισθούν με τους συνήθεις μετασχηματισμούς, ενώ ο μετασχηματισμός Φωκά είναι ικανός να παράξει και σε αυτές τις περιπτώσεις αναλυτικές λύσεις οι οποίες συγκλίνουν ομοιόμορφα στο σύνορο και επομένως μπορούν να προσεγγιστούν αποδοτικά από αριθμητικές μεθόδους.
- Η μέθοδος Φωκά χρησιμοποιείται για την ανάλυση του κυβικού μη-γραμμικού Schrödinger (NLS) ΠΑΣΣ στην ημιευθεία και με δεδομένα στους χώρους Sobolev. Αρχικά επιλύεται το γραμμικό ομογενές Schrödinger ΠΑΣΣ, με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev, και παράγονται οι βασικές χωρικές και χρονικές εκτιμήσεις της λύσης. Στη συνέχεια επιλύεται το αντίστοιχο μη ομογενές γραμμικό Schrödinger ΠΑΣΣ διασπώντας το

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

κατάλληλα σε ένα ομογενές ΠΑΣΣ με δεδομένα σε χώρους Sobolev και σε ένα μη ομογενές ΠΑΣΣ με μηδενικά δεδομένα. Οι εκτιμήσεις αυτές χρησιμοποιούνται για να εξασφαλισθεί ότι το NLS ΠΑΣΣ είναι καλώς ορισμένο με δεδομένα $(u(x,0), u(0,t))$ στον $H_x^s(0,\infty) \times H_t^{(2s+1/4)}(0,T), s > 1/2$. Με αυτή την εργασία η μέθοδος Φωκά τίθεται στο ευρύτερο πλαίσιο των μεθόδων για εξελικτικές εξισώσεις στους χώρους Sobolev.

Για τεχνική ανάλυση και μεθοδολογία παραπέμπουμε στις σχετικές δημοσιεύσεις που παρατίθενται στην παράγραφο των παραδοτέων.

2 Μεθοδολογία

2.1 Μέθοδος Φωκά για παραβολικά γραμμικά προβλήματα, με χωρικές και χρονικές ασυνέχειες, στις $1+1$ διαστάσεις

2.1.1 Το Πρόβλημα Μοντέλο

Για την μελέτη ΠΑΣΣ-ΠΠ που παρουσιάζουν ασυνέχειες τόσο στο χρόνο όσο και στο χώρο, και έχοντας υπόψιν το πρόβλημα διάχυσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στο οποίο έχουν ενσωματωθεί και πρωτόκολλα θεραπείας (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2), θεωρούμε ένα πρόβλημα-μοντέλο (βλ. σχήμα 1) το οποίο περιγράφεται από τις σχέσεις:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D(x,t)\dfrac{\partial c}{\partial x}\right) + \rho(t)\, c\ ,\ x \in [a,b]\ ,\ 0 < t \le T_F \\ c\,(x,0) = f(x) \\ c_x\,(a,t) = c_x\,(b,t) = 0 \end{cases} . \tag{1}$$

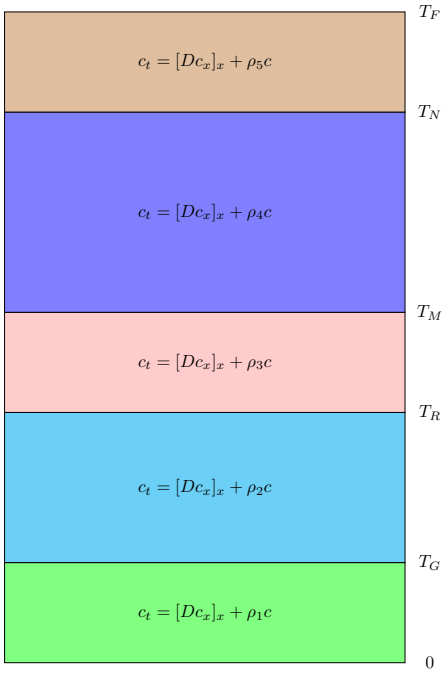
Οι συντελεστές αναπαραγωγής (proliferation) $\rho \equiv \rho(t)$ και διάχυσης (diffusion) $D = D(x,t)$ χαρακτηρίζουν το πρόβλημα με χρονικές και χωρικές ασυνέχειες, αντίστοιχα. Για τον συντελεστή αναπαραγωγής $\rho \equiv \rho(t)$ θεωρούμε ότι ορίζεται από την σχέση

$$\rho \equiv \rho(t) = \begin{cases} \rho_1\ ,\ 0 < t \le T_G \\ \rho_2\ ,\ T_G < t \le T_R \\ \rho_3\ ,\ T_R < t \le T_M \\ \rho_4\ ,\ T_M < t \le T_N \\ \rho_5\ \ ,\ T_N < t \le T_F \end{cases} \quad ,\ \ \rho_\ell \in \mathbb{R}, \tag{2}$$

όπου οι διαφορετικές χρονικές περιοχές σηματοδοτούν διαφορετικούς ρυθμούς αναπαραγωγής (π.χ. λόγω εφαρμογής διαφορετικών πρωτοκόλλων θεραπείας) που απεικονίζονται και στο Σχήμα 1. Σημειώνουμε ότι ο αριθμός των χρονικών

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

περιόδων μπορεί τετριμμένα να γενικευτεί και επομένως ο περιορισμός σε πέντε γίνεται χωρίς καμία βλάβη της γενικότητας.

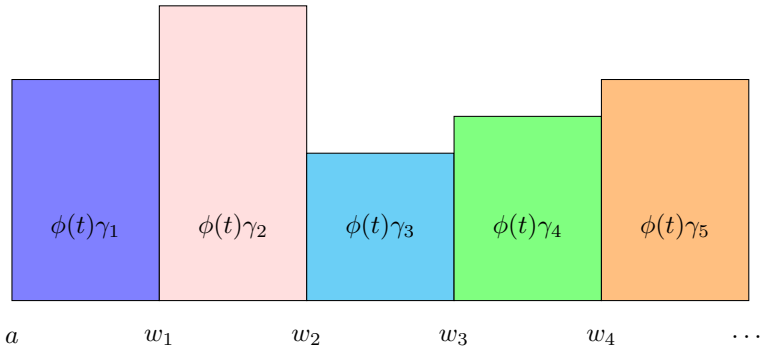


Σχήμα 1: Χρονικές περίοδοι με διαφορετικό συντελεστή αναπαραγωγής $\rho \equiv \rho(t)$.

Ο συντελεστής διάχυσης $D = D(x,t)$ χαρακτηρίζει το ΠΑΣΣ ως πρόβλημα Πολλαπλών (χωρικών) Πεδίων (ΠΠ) και ορίζεται από τη σχέση

$$D(x,t) = \phi(t)\gamma_j \ , \ x \in R_j \ , \ j = 1, \ldots, n+1 \tag{3}$$

όπου $\gamma_j \in \mathbb{R}$, $\phi(t)$ είναι συνεχής συνάρτηση του t και $R_j := (w_{j-1}, w_j)$ με w_j να συμβολίζουν τα σημεία χωρικής διεπαφής που ικανοποιούν την $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < \ldots < w_n < w_{n+1} \equiv b$ όπως επιδεικνύεται και στο Σχήμα (2).



Σχήμα 2: Ο χωρικά ασυνεχής συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x,t)$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Θέτοντας τώρα,

$$\begin{cases} c\left(x,t_1\right)=c\left(x,t\right) & , \quad t\in\left(0,T_G\right] \\ c\left(x,t_2\right)=c\left(x,t-T_G\right) & , \quad t\in\left(T_G,T_R\right] \\ c\left(x,t_3\right)=c\left(x,t-T_R\right) & , \quad t\in\left(T_R,T_M\right] \\ c\left(x,t_4\right)=c\left(x,t-T_M\right) & , \quad t\in\left(T_M,T_N\right] \\ c\left(x,t_5\right)=c\left(x,t-T_N\right) & , \quad t\in\left(T_N,T_F\right] \end{cases} . \tag{4}$$

το πρόβλημα (1) μπορεί να γραφεί στην παρακάτω μορφή

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t_\ell}=\dfrac{\partial}{\partial x}\left(D\dfrac{\partial c}{\partial x}\right)+\rho_\ell\, c\ ,\ x\in[a,b]\ ,\ 0<t_\ell\leq T_\ell \\ c\left(x,0\right)=c_\ell(x) \\ c_x\left(a,t_\ell\right)=c_x\left(b,t_\ell\right)=0 \end{cases} \tag{5}$$

με

$$\begin{cases} T_1=T_G \\ T_2=T_R-T_G \\ T_3=T_M-T_R \\ T_4=T_N-T_M \\ T_5=T_F-T_N \end{cases} \tag{6}$$

και

$$\begin{cases} c_1(x)=f(x) \\ c_2(x)=c(x,T_1) \\ c_3(x)=c(x,T_2) \\ c_4(x)=c(x,T_3) \\ c_5(x)=c(x,T_4) \end{cases} \tag{7}$$

2.1.2 Χρονικοί Μετασχηματισμοί

Για να απαλείψουμε τον όρο $\rho_\ell c$ στο (5) θα χρησιμοποιήσουμε το παρακάτω λήμμα:

Λήμμα 1. *Εαν η* $c(x,t)$ *ικανοποιεί την εξίσωση*

$$\frac{\partial c}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D(x,t)\frac{\partial c}{\partial x}\right)+\rho\, c$$

και η $u(x,t)$ *ορίζεται από*

$$u(x,t)=e^{-R(t)}c(x,t), \tag{8}$$

με

$$R(t)=\int_0^t \rho(s)ds\ , \tag{9}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

τότε η $u(x,t)$ *ικανοποιεί την εξίσωση*

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x,t)\frac{\partial u}{\partial x}\right) \tag{10}$$

Απόδειξη : Παρατηρώντας ότι $\dot{R}(t) = \rho(t)$ και παραγωγίζοντας την (8) ως προς t, εύκολα βλέπουμε ότι :

$$e^{-R(t)}\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}u(x,t) + \rho(t)u(x,t)\ . \tag{11}$$

Πολλαπλασιάζοντας τώρα την (1) με $e^{-R(t)}$ καταλήγουμε στην

$$e^{-R(t)}\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x,t)\frac{\partial}{\partial x}u(x,t)\right) + \rho(t)u(x,t)\ , \tag{12}$$

η οποία συνδυαζόμενη με την σχέση (11) ολοκληρώνει την απόδειξη. ■

Το πρόβλημα (5) μετά από την εφαρμογή του λήμματος (1) γράφεται ως εξής:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t_\ell} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D\dfrac{\partial u}{\partial x}\right)\ ,\ x \in [a,b]\ ,\ 0 < t_\ell \leq T_\ell \\ u\left(x,0\right) = u_\ell(x) \equiv c_\ell(x) \\ u_x\left(a,t_\ell\right) = u_x\left(b,t_\ell\right) = 0 \end{cases} \tag{13}$$

Για να απλοποιήσουμε περαιτέρω την εξίσωση στο πρόβλημα (13), δεδομένου ότι το D εξαρτάται και από τον χρόνο (βλ. 3), θα κάνουμε αλλαγή της χρονικής μεταβλητής όπως περιγράφεται στο παρακάτω λήμμα

Λήμμα 2. *Εάν η* $u(x,t)$ *ικανοποιεί την εξίσωση*

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x,t)\frac{\partial u}{\partial x}\right)$$

με $D(x,t) = D(x)\phi(t)$*, τότε κάνοντας την αλλαγή μεταβλητών*

$$\tau \equiv \tau(t) = \int_0^t \phi(s)ds\ , \tag{14}$$

η $u(x,\tau)$ *ικανοποιεί την εξίσωση:*

$$\frac{\partial}{\partial \tau}u(x,\tau) = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial}{\partial x}u(x,\tau)\right)\ . \tag{15}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Απόδειξη : Γράφοντας $D(x,t) = \phi(t)D(x)$ η εξίσωση (10) του Λήμματος 1 γίνεται:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \phi(t)\frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial}{\partial x}u(x,\tau)\right) \ . \tag{16}$$

Το γεγονός ότι :

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \frac{d\tau}{dt}\frac{\partial}{\partial \tau}u(x,\tau) = \phi(t)\frac{\partial}{\partial \tau}u(x,\tau) \ , \tag{17}$$

ολοκληρώνει την απόδειξη. ■

Το πρόβλημα (13) μετά από την εφαρμογή του λήμματος (2) γράφεται ως εξής:

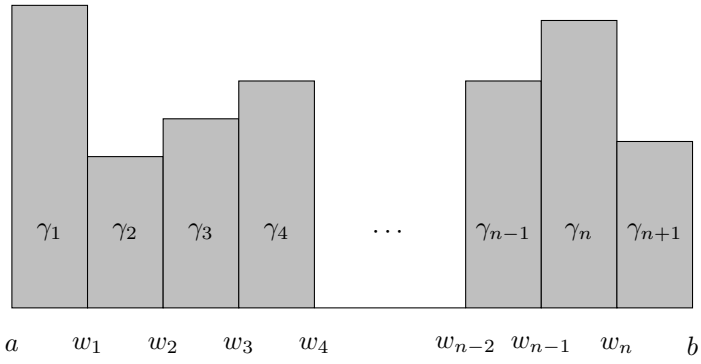
$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial \tau_\ell} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D\dfrac{\partial u}{\partial x}\right) \ , \ x \in [a,b] \ , \ 0 < \tau_\ell \leq S_\ell \\ u\left(x,0\right) = u_\ell(x) \\ u_x\left(a,\tau_\ell\right) = u_x\left(b,\tau_\ell\right) = 0 \end{cases} \tag{18}$$

όπου

$$S_\ell = \int_0^{T_\ell} \phi(s)ds \ , \tag{19}$$

και η συνάρτηση $D(x)$ ορίζεται ως (βλ. σχήμα 3):

$$D = D(x) = \gamma_j \ , \ x \in R_j \ , \ j = 1,\ldots,n+1 \tag{20}$$



Σχήμα 3: Η συνάρτηση $D(x)$ σε $n+1$ περιοχές.

Επισημαίνουμε επίσης ότι η παραβολική φύση του προβλήματος συνεπάγεται συνέχεια των u και Du_x στα σημεία διεπαφής w_j, για κάθε $j = 1,2,\ldots,n$ και $\ell = 1,\ldots,5$, και επομένως

$$\begin{cases} \lim\limits_{x\to w_j^+} u(x,\tau_\ell) = \lim\limits_{x\to w_j^-} u(x,\tau_\ell) \\ \lim\limits_{x\to w_j^+} D(x)u_x(x,\tau_\ell) = \lim\limits_{x\to w_j^-} D(x)u_x(x,\tau_\ell) \end{cases} \ . \tag{21}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.2 Μέθοδος Φωκά

2.2.1 Ολική Συνθήκη

Επανονομάζοντας, για λόγους απλότητας συμβολισμού, το τ_ℓ με t (δηλ. $\tau_\ell \to t$) και το S_ℓ με T (δηλ. $S_\ell \to T$) , ας συμβολίσουμε με $u^{(j)}(x,t)$ τη λύση του18 στη περιοχή $[w_{j-1}, w_j] \times [0,T]$, η οποία ορίζεται από τη σχέση:

$$u^{(j)}(x,t) := \begin{cases} u(x,t), & x \in R_j = (w_{j-1}, w_j) \\ \lim_{x \to w_{j-1}^+} u(x,t), & x = w_{j-1} \\ \lim_{x \to w_j^-} u(x,t), & x = w_j \end{cases}, \quad j = 1, \ldots, n+1, \tag{22}$$

και, επιπροσθέτως,

$$u_x^{(j)}(w_{j-1}, t) := \lim_{x \to w_{j-1}^+} u_x(x,t) \quad \text{και} \quad u_x^{(j)}(w_j, t) := \lim_{x \to w_j^-} u_x(x,t) \, . \tag{23}$$

Τότε θα ισχύει

$$u_t^{(j)} = (\gamma_j u_x^{(j)})_x = \gamma_j u_{xx}^{(j)} \, , \tag{24}$$

και χρησιμοποιώντας τους περιορισμούς (21), έχουμε επίσης ότι:

$$u^{(j)}(w_j, t) = u^{(j+1)}(w_j, t) \quad \text{και} \quad \gamma_j u_x^{(j)}(w_j, t) = \gamma_{j+1} u_x^{(j+1)}(w_j, t) \, . \tag{25}$$

Στην περιοχή $\overline{R_j} = [w_{j-1}, w_j]$ παρατηρούμε ότι η $u^{(j)}(x,t)$ ικανοποιεί την εξίσωση:

$$u_t^{(j)} = (\gamma_j u_x^{(j)})_x = \gamma_j u_{xx}^{(j)} \tag{26}$$

και η formal adjoint $\tilde{u}_t^{(j)}$ ικανοποιεί την εξίσωση:

$$-\tilde{u}_t^{(j)} = \gamma_j \tilde{u}_{xx}^{(j)} \, . \tag{27}$$

Πολλαπλασιάζοντας τις εξισώσεις (24) και (27) με $\tilde{u}$ και u, αντίστοιχα , και αφαιρόντας τις εξισώσεις που παράγονται καταλήγουμε στην :

$$(u^{(j)} \tilde{u}^{(j)})_t - (\gamma_j u_x^{(j)} \tilde{u}^{(j)} - \gamma_j u^{(j)} \tilde{u}_x^{(j)})_x = 0. \tag{28}$$

Δεδομένου ότι μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (27) δίνεται από τη σχέση:

$$\tilde{u}^{(j)}(x,t,k) = e^{-ikx + \gamma_j k^2 t}, \; k \in \mathbb{C}. \tag{29}$$

η εξίσωση (28) γίνεται:

$$(e^{-ikx+\gamma_j k^2 t} u)_t - (e^{-ikx+\gamma_j k^2 t} \gamma_j (u_x + iku))_x, \; k \in \mathbb{C}, \tag{30}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

η οποία είναι η divergence form της εξίσωσης (24). Ολοκληρώνοντας στην περιοχή $A_j := \{(x,t) : x \in \overline{R_j},\ 0 \le t \le T\}$ και χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Green καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\begin{aligned}
&\int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x)dx - \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx+\gamma_j k^2 T} u^{(j)}(x,T)dx \\
&- \int_0^T e^{-ikw_{j-1}+\gamma_j k^2 t}\gamma_j (u_x^{(j)}(w_{j-1},t) + iku^{(j)}(w_{j-1},t))dt \\
&+ \int_0^T e^{-ikw_j+\gamma_j k^2 t}\gamma_j (u_x^{(j)}(w_j,t) + iku^{(j)}(w_j,t))dt = 0\ .
\end{aligned} \tag{31}$$

Αν η $f^{(j)}(x)$ είναι η αρχική συνθήκη στην $\overline{R_j}$,

$$f^{(j)}(x) = f|_{\overline{R_j}}(x)$$

$\widehat{f}^{(j)}(x)$ και $\widehat{q}^{(j)}(k,t)$ είναι η μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων $f^{(j)}(x)$ και $u^{(j)}(x,t)$, αντίστοιχα

$$\widehat{f}^{(j)}(k) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x)dx \tag{32}$$

$$\widehat{u}^{(j)}(k,t) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} u^{(j)}(x,t)dx, \tag{33}$$

και $\widetilde{u}^{(j)}$ και $\widetilde{u}_x^{(j)}$ δίνονται από τις σχέσεις :

$$\widetilde{u}^{(j)}(x,\gamma_j k^2) := \int_0^T e^{\gamma_j k^2 t} u^{(j)}(x,t)dt \tag{34}$$

$$\widetilde{q}_x^{(j)}(x,\gamma_j k^2) := \int_0^T e^{\gamma_{l(j)} k^2 t} u_x^{(j)}(x,t)dt. \tag{35}$$

τότε η εξίσωση (31) παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned}
e^{\gamma_j k^2 T}\widehat{u}^{(j)}(k,T) \;=\; \widehat{f}^{(j)}(k) \;&-\; \gamma_j e^{-ikr_{j-1}}(\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},\gamma_j k^2) \;+\; ik\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},\gamma_j k^2)) \\
&+\; \gamma_j e^{-ikr_j}(\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,\gamma_j k^2) \;+\; ik\widetilde{u}^{(j)}(w_j,\gamma_j k^2)),
\end{aligned} \tag{36}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$. Η (36) ισχύει για όλα τα $t \in [0,T]$. Αντικαθιστώντας το T με t έχουμε :

$$e^{\gamma_j k^2 t}\widehat{u}^{(j)}(k,t) = \widehat{f}^{(j)}(k) - \gamma_j e^{-ikw_{j-1}}\left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},\gamma_j k^2) + ik\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},\gamma_j k^2)\right] + \gamma_j e^{-ikw_j}\left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,\gamma_j k^2) + ik\widetilde{u}^{(j)}(w_j,\gamma_j k^2)\right], \tag{37}$$

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$. Η τελευταία εξίσωση καλείται *"Ολική Συνθήκη"*.

2.2.2 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης

Θέτοντας $\lambda_j^2 = \gamma_j k^2$ και $c_j = \gamma_j^{-\frac{1}{2}}$ an στην εξίσωση (37) και στη συνέχεια μετονομάζοντας το λ το k η σχέση γίνεται:

$$e^{k^2 t}\widehat{u}^{(j)}(c_j k,t) = \widehat{f}^{(j)}(c_j k) - \gamma_j e^{-ic_j k w_{j-1}}(\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2) + ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)) + \gamma_j e^{-ic_j k w_j}(\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2) + ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)), \tag{38}$$

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$. Αντιστρέφοντας τους μετασχηματισμούς Fourier $\widehat{u}^{(j)}(c_j k,t)$ στην εξίσωση (38) έχουμε:

$$\begin{aligned} u^{(j)}(x,t) &= \frac{c_j}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j kx - k^2 t}\widehat{f}^{(j)}(c_j k)dk \\ &- \frac{1}{2\pi c_j}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x-w_{j-1})-k^2 t}\left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2) + ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)\right]dk \\ &- \frac{1}{2\pi c_j}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x-w_j)-k^2 t}\left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2) + ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)\right]dk. \end{aligned} \tag{39}$$

Στην παραπάνω έκφραση για την λύση $u^{(j)}(x,t)$ εμφανίζονται κάποιες άγνωστες ποσότητες :

- $\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)$ για κάθε $j = 1,2,\ldots,n+1$
- $\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)$ για κάθε $j = 1,2,\ldots,n+1$
- $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2)$ για κάθε $j = 2,3,\ldots,n+1$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2)$ για κάθε $j = 1, 2, \ldots, n$.

Χρησιμοποιώντας την απεικόνιση $k \to -k$ η εξίσωση (37) γίνεται :

$$e^{k^2 t}\widehat{u}^{(j)}(-c_j k, t) = \widehat{f}^{(j)}(-c_j k) - \gamma_j e^{ic_j k w_{j-1}}(\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) - ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2) + \gamma_j e^{ic_j k w_j}(\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) - ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2), \tag{40}$$

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$.

Λαμβάνοντας υπόψιν τόσο τους περιορισμούς (25) όσο και τις συνοριακές συνθήκες, οι ολικές συνθήκες (38) (40) γίνονται :

- για $j = 1$:

$$ic_1\gamma_1 k e^{-ic_1 k r_0}\widetilde{u}^{(1)}(w_0, k^2) - ic_1\gamma_1 k e^{-ic_1 k w_1}\widetilde{u}^{(1)}(w_1, k^2) + \gamma_1 e^{-ic_1 k w_1}\widetilde{u}_x^{(1)}(w_1, k^2) = \widehat{f}(c_1 k) \tag{41}$$

$$-ic_1\gamma_1 k e^{ic_1 k w_0}\widetilde{u}^{(1)}(w_0, k^2) + ic_1\gamma_1 k e^{ic_1 k w_1}\widetilde{u}^{(1)}(w_1, k^2) - \gamma_1 e^{-ic_1 k w_1}\widetilde{u}_x^{(1)}(w_1, k^2) = \widehat{f}(-c_1 k), \tag{42}$$

- για $j = 2, 3, \ldots, n$:

$$ic_j\gamma_j k e^{-ic_j k w_{j-1}}\widetilde{u}^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) + \gamma_{l(j-1)} e^{-ic_j k w_{j-1}}\widetilde{u}_x^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) - ic_j\gamma_j k e^{-ic_j k w_j}\widetilde{u}^{(j)}(r_j, k^2) - \gamma_j e^{-ic_j k r_j}\widetilde{u}_x^{(j)}(r_j, k^2) = \widehat{f}(c_j k) \tag{43}$$

$$-ic_j\gamma_j k e^{ic_j k w_{j-1}}\widetilde{u}^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) + \gamma_{j-1} e^{ic_j k w_{j-1}}\widetilde{u}_x^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) + ic_j\gamma_j k e^{ic_j k w_j}\widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2) - \gamma_j e^{-ic_j k w_j}\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) = \widehat{f}(-c_j k), \tag{44}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- για $j = n+1$:

$$ic_{l(n+1)}\gamma_{n+1}ke^{-ic_{n+1}kr_n}\widetilde{u}^{(n)}(w_n,k^2)+\gamma_n e^{-ic_{n+1}kw_n}\widetilde{u}_x^{(n)}(w_n,k^2)$$
$$-ic_{n+1}\gamma_{n+1}ke^{-ic_{n+1}kw_{n+1}}\widetilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1},k^2) = \widehat{f}(c_{n+1}k) \quad (45)$$

$$-ic_{n+1}\gamma_{n+1}ke^{ic_{n+1}kr_n}\widetilde{u}^{(n)}(w_n,k^2)+\gamma_n e^{ic_{n+1}kr_n}\widetilde{u}_x^{(n)}(w_n,k^2)$$
$$+ic_{n+1}\gamma_{n+1}ke^{ic_{n+1}kw_{n+1}}\widetilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1},k^2) = \widehat{f}(-c_{n+1}k)\,. \quad (46)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις μας οδηγούν στο $2(n+1)\times 2(n+1)$ γραμμικό σύστημα , η λύση του οποίου μας προσδιορίζει τις άγνωστες ποσότητες $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2)$ και $\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)$.

$$G\widetilde{\mathbf{u}} = \widehat{\mathbf{f}}, \quad (47)$$

με

$$G = \begin{bmatrix}
A_1^{(1)} & A_3^{(1)} & A_4^{(1)} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
A_5^{(1)} & A_7^{(1)} & A_8^{(1)} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & A_1^{(2)} & A_2^{(2)} & A_3^{(2)} & A_4^{(2)} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & A_5^{(2)} & A_6^{(2)} & A_7^{(2)} & A_8^{(2)} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_1^{(n)} & A_2^{(n)} & A_3^{(n)} & A_4^{(n)} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_5^{(n)} & A_6^{(n)} & A_7^{(n)} & A_8^{(n)} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & A_1^{(n+1)} & A_2^{(n+1)} & A_3^{(n+1)} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & A_5^{(n+1)} & A_6^{(n+1)} & A_7^{(n+1)}
\end{bmatrix},$$

$$\widetilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix}
\widetilde{u}^{(1)}(w_0,k^2) \\
\widetilde{u}^{(1)}(w_1,k^2) \\
\widetilde{u}_x^{(1)}(w_1,k^2) \\
\vdots \\
\widetilde{u}^{(n)}(w_n,k^2) \\
\widetilde{u}_x^{(n)}(w_n,k^2) \\
\widetilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1},k^2)
\end{bmatrix} \text{ και } \widehat{\mathbf{f}} = \begin{bmatrix}
\widehat{f}^{(1)}(c_1k) \\
\widehat{f}^{(1)}(-c_1k) \\
\widehat{f}^{(2)}(c_2k) \\
\widehat{f}^{(2)}(-c_2k) \\
\vdots \\
\widehat{f}^{(n)}(c_nk) \\
\widehat{f}^{(n)}(-c_nk) \\
\widehat{f}^{(n+1)}(c_{n+1}k) \\
\widehat{f}^{(n+1)}(-c_{n+1}k)
\end{bmatrix}.$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

με τις τιμές των $A_i^{(j)}$ να δίνονται από

i	$A_i^{(j)}$
1	$ic_j\gamma_j k e^{-ic_j k w_{j-1}}$
2	$\gamma_{j-1} e^{-ic_j k w_{j-1}}$
3	$-ic_j\gamma_j k e^{-ic_j k w_j}$
4	$-\gamma_j e^{-ic_j k w_j}$
5	$-ic_j\gamma_j k e^{ic_j k w_{j-1}}$
6	$\gamma_{j-1} e^{ic_j k w_{j-1}}$
7	$ic_j\gamma_j k e^{ic_j k w_j}$
8	$-\gamma_j e^{ic_j k w_j}$

Επαναφέροντας τώρα τον πρωτότυπο συμβολισμό των μεταβλητών του χρόνου, η λύση του προβλήματος 18 $u^{(j)}(x,\tau_\ell)$ στην περιοχή $[w_{j-1},w_j]\times[0,S_\ell]$ προφανώς δίνεται από την σχέση

$$\begin{aligned} u^{(j)}(x,\tau_\ell) \;=\; & \frac{c_j}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k x - k^2\tau_\ell}\widehat{u}_\ell^{(j)}(c_j k)dk \\ & -\frac{1}{2\pi c_j}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x-w_{j-1})-k^2\tau_\ell} \\ & \cdot[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2)+ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)]dk \\ & -\frac{1}{2\pi c_j}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x-w_j)-k^2\tau_\ell} \\ & \cdot[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2)+ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)]dk\;, \end{aligned} \tag{48}$$

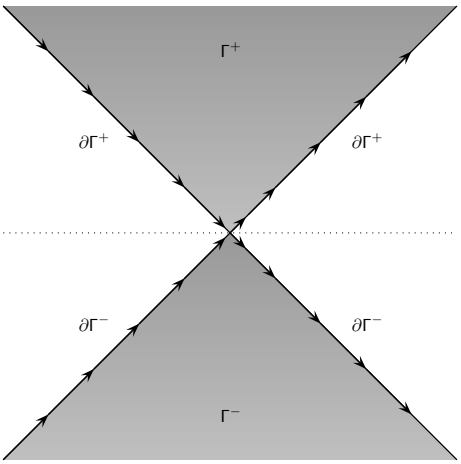
Η αναλυτικότητα των συναρτήσεων που εμπλέκονται στην ολοκληρωτική αναπαράσταση των λύσεων $u^{(j)}(x,\tau_\ell)$, μας επιτρέπει την αντικατάσταση του πραγματικού άξονα $(-\infty,\infty)$ με άλλα μονοπάτια ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για να επιτύχουμε εκθετική, κατά απόλυτη τιμή, μείωση των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων όσο απομακρυνόμαστε από το μηδέν. Για παράδειγμα, στην ολοκληρωτική αναπαράσταση της $u^{(1)}(x,\tau_\ell)$ στην (48), παρατηρούμε ότι:

- η ποσότητα $e^{ick(x-w_1)}$ είναι αναλυτική και φραγμένη για $Im(k)<0$
- η ποσότητα $e^{ick(x-a)}$ είναι αναλυτική και φραγμένη για $Im(k)>0$
- η ποσότητα e^{-k^2t} είναι αναλυτική και φραγμένη για $Re(k^2)\geq 0$.

Κατόπιν, βασιζόμενοι στον παρακάτω ορισμό των χωρίων Γ, Γ^+ και Γ^- (δες επίσης το γράφημα 4)

$$\Gamma=\{k\in\mathbb{C}:\mathsf{Re}\,k^2<0\}=\{k\in\mathbb{C}:\arg k\in\{(\frac{\pi}{4},\frac{3\pi}{4})\cup(\frac{5\pi}{4},\frac{7\pi}{4})\}\} \tag{49}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 4: Τα μονοπάτια ολοκλήρωσης $\partial\Gamma^+$ και $\partial\Gamma^-$

$$\Gamma^+ = \{k : \arg k \in (\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4})\} = \Gamma \cap \mathbb{C}^+ \tag{50}$$

$$\Gamma^- = \{k : \arg k \in (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\} = \Gamma \cap \mathbb{C}^- \tag{51}$$

μπορούμε ισοδύναμα να εκφράσουμε (δες επίσης [7]) τα $u^{(j)}(x,\tau_\ell)$ και ως

$$\begin{aligned} u^{(j)}(x,\tau_\ell) \;=\; & \frac{c_j}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jkx-k^2\tau_\ell}\widehat{u}_\ell^{(j)}(c_jk)dk \\ & -\frac{1}{2\pi c_j}\int_{\partial\Gamma^+} e^{ic_jk(x-w_{j-1})-k^2\tau_\ell} \\ & \cdot[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2)+ic_jk\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)]dk \\ & -\frac{1}{2\pi c_j}\int_{\partial\Gamma^-} e^{ic_jk(x-w_j)-k^2\tau_\ell} \\ & \cdot[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2)+ic_jk\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)]dk\ . \end{aligned} \tag{52}$$

2.2.3 Αριθμητική Ολοκλήρωση

Η λύση $u^{(j)}(x,\tau_\ell)$ (52) μπορεί να εκφραστεί και στη μορφή:

$$u^{(j)}(x,\tau_\ell) \;=\; \frac{c_j}{2\pi}I^\ell_{(-\infty,\infty)} - \frac{1}{2\pi c_j}I^\ell_{\partial\Gamma^+} - \frac{1}{2\pi c_j}I^\ell_{\partial\Gamma^-} \tag{53}$$

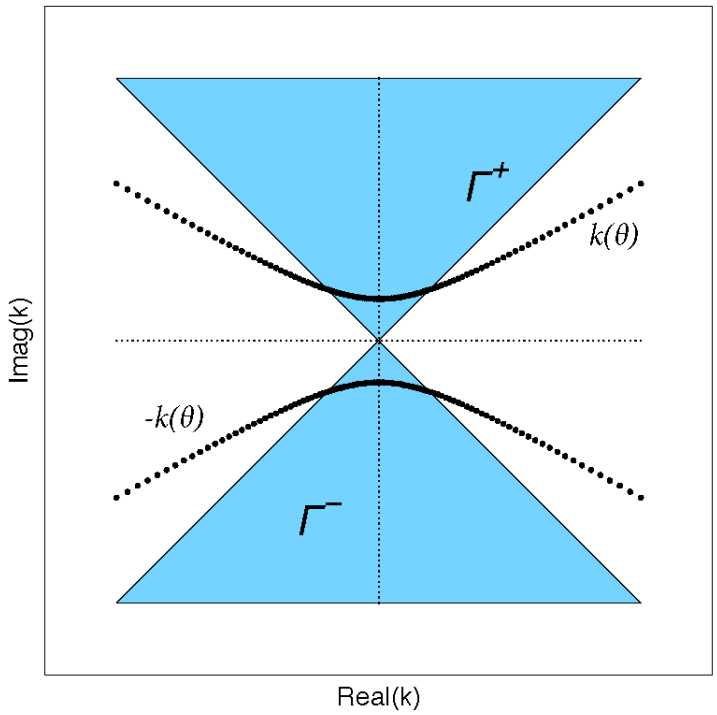
όπου $I^\ell_{(-\infty,\infty)}$, $I_{\partial\Gamma^+}$ και $I_{\partial\Gamma^-}$ είναι το πρώτο, το δεύτερο και τρίτο αντίστοιχα ολοκλήρωμα της (52).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Για τον αποδοτικό αριθμητικό υπολογισμό των $I_{\partial\Gamma^+}$ και $I_{\partial\Gamma^-}$, χρησιμοποιούμε τον κανόνα του τραπεζίου πάνω σε κατάλληλα μονοπάτια ολοκλήρωσης ώστε να πετύχουμε εκθετικούς ρυθμούς σύγκλισης (βλ. [15], [8], [4], [9], [1]). Γι'αυτό το λόγο αντικαθιστούμε (βλ.[1]) τα μονοπάτια ολοκλήρωσης $\partial\Gamma^{\pm}$ με υπερβολές του μιγαδικού επιπέδου μέσω του μετασχηματισμού:

$$k_\theta \equiv k(\theta) := i\,\sin(\beta - i\theta), \tag{54}$$

όπου η γωνία β έχει επιλεχθεί να είναι $\beta = \pi/6$ και οι καμπύλες $\pm k(\theta)$ απεικονίζονται στο Σχ. 5.



Σχήμα 5: The contours $\pm k(\theta)$ for numerical integration

Συνεπώς

$$\begin{aligned} I_{\partial\Gamma^+} \;=\; & \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k_\theta (x - w_{j-1}) - k_\theta^2 \tau_\ell}\cdot \\ & \cdot\,[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k_\theta^2) + ic_j k_\theta \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k_\theta^2)]k'_\theta dk_\theta \;, \end{aligned} \tag{55}$$

και

$$\begin{aligned} I_{\partial\Gamma^-} \;=\; & \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ic_j k_\theta (x - w_j) - k_\theta^2 \tau_\ell}\cdot \\ & \cdot\,[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k_\theta^2) - ic_j k_\theta \widetilde{u}^{(j)}(w_j, k_\theta^2)]k'_\theta dk_\theta \;, \end{aligned} \tag{56}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όπου k'_θ είναι η παράγωγος του $k(\theta)$.

Για την αποδοτική εφαρμογή του κανόνα ολοκλήρωσης στα ολοκληρώματα (55) και (56) (βλ. [1]) πρεπεί να λαβουμε υπ'όψιν τις παρακάτω ιδιότητες:

- Τα πραγματικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι άρτιες συναρτήσεις του *even* functions of θ.
- Τα φανταστικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι περιττές συναρτήσεις του θ.
- Οι προς ολοκλήρωση ποσότητες είναι φθίνουσες συναρτήσεις του $|\theta|$.

Η εφαρμογή των παραπάνω ιδιοτήτων έχει ως άμεση συνέπεια:

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\theta)d\theta = 2\int_{0}^{\infty} \mathrm{Re}\left(U(\theta)\right) d\theta \approx 2\int_{0}^{\Theta} \mathrm{Re}\left(U(\theta)\right) d\theta \ ,$$

όπου $U(\theta)$ δηλώνει οποιαδήποτε από τις δύο προς ολοκλήρωση ποσότητες που εμπλέκονται στις(55)-(56) και Θ είναι ένας σχετικά μικρός πραγματικός αριθμός. Για μια καλή εκτίμηση του Θ κάποιος πρέπει να απαιτήσει ο κυρίαρχος εκθετικός όρος $e^{-k_\theta^2\tau_\ell}$, που είναι κοινός σε όλα τα ολοκληρώματα να ικανοποιεί την σχέση:

$$\left|e^{-k_\theta^2\tau_\ell}\right| \leq 10^{-M} \ \text{ for all } \ \theta \geq \Theta \equiv \Theta(\tau_\ell; M)$$

για ικανοποιητικά μεγάλο M,(βλ. [6])

$$\Theta = \frac{1}{2}\ln\frac{4\tau + 8M\ln 10}{\tau_\ell} \ . \tag{57}$$

Για τον αριθμητικό υπολογισμό του $I^\ell_{(-\infty,\infty)}$ στο (53), λαμβανουμε υπ'οψιν την (33) και έχουμε:

$$\begin{aligned} I^\ell_{(-\infty,\infty)} &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ic_jkx}e^{-k^2\tau_\ell}\widehat{u}^{(j)}_\ell(c_jk)dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{ic_jkx}e^{-k^2\tau_\ell}\int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ic_jkx}u^{(j)}_\ell(x)dx\ dk \ . \end{aligned} \tag{58}$$

Στην περίπτωση που ως αρχική συνθήκη επιλέξουμε ένα γραμμικό συνδυασμό συναρτήσεων δέλτα του Dirac

$$u^{(j)}_1(x) = \sum_{r=1}^{M_\delta} \zeta_r\delta(x-\xi_r) \tag{59}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

και $\xi_r \in (w_{j-1}, w_j)$, είναι προφανές ότι

$$\widehat{u}_1^{(j)}(c_j k) = \sum_r \zeta_r e^{-ic_j k \xi_r}, \ r \text{ τέτοιο ώστε } \xi_r \in (w_{j-1}, w_j) \tag{60}$$

και επομένως

$$I^1_{(-\infty,\infty)} = \frac{c_j}{2\sqrt{\tau_\ell \pi}} \sum_r \zeta_r e^{-\frac{c_j^2(\xi_r - x)^2}{4\tau_\ell}}. \tag{61}$$

Για $\ell \geq 2$, η $u_\ell^{(j)}(x) = u^{(j)}(x, \tau_\ell)$ δίνεται από την (52) και επομένως η $\widehat{u}_\ell^{(j)}(c_j k)$ πρέπει να υπολογιστεί από ένα ικανοποιητικά ακριβή κανόνα ολοκλήρωσης αφού οι αντίθετοι εκθέτες στους εκθετικούς όρους της (58) οδηγούν το k να είναι πραγματικός αριθμός. Σε αυτή την περίπτωση θεωρώντας την εφαρμογή ενός N_q σημείων Gaussian or Clenshaw-Curtis κανόνα ολοκλήρωσης μπορούμε να γράψουμε

$$\widehat{u}_\ell^{(j)}(x) \approx \sum_{\kappa=1}^{N_q} \alpha_\kappa e^{-ic_j k x_\kappa} u_\ell^{(j)}(x_\kappa) \tag{62}$$

και επομένως

$$I^\ell_{(-\infty,\infty)} \approx \frac{c_j}{2\sqrt{\tau_\ell \pi}} \sum_{\kappa=1}^{N_q} \alpha_\kappa u_\ell^{(j)}(x_\kappa) e^{-\frac{c_j^2(x_\kappa - x)^2}{4\tau_\ell}}. \tag{63}$$

3 Αποτελέσματα

3.0.1 Μοντέλα Ραδιοθεραπείας / Ακτινοθεραπείας

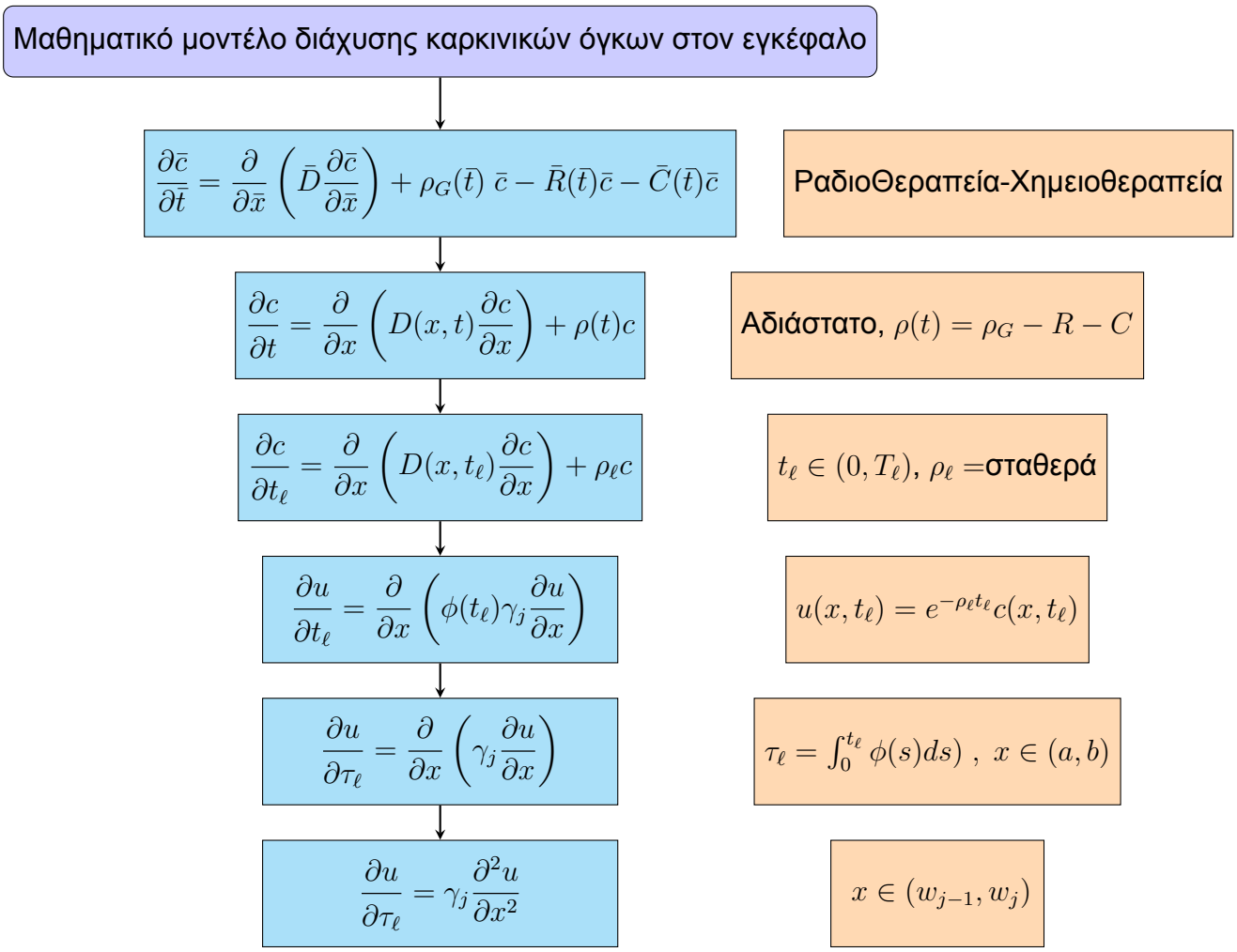
Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, το ΠΑΣΣ (5) χρησιμοποιείται για να περιγράψει [12] μαθηματικά μοντέλα διάχυσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, τα οποία, πέρα από την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού, ενσωματώνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας ή/και ακτινοθεραπείας [11, 14, 16, 5, 3]. Σε αυτή την περίπτωση θεωρούμε ότι ο συντελεστής διάχυσης $D(x,t)$, ο οποίος περιγράφει τον ρυθμό διείσδυσης των καρκινικών κυττάρων σε ανομοιογενή (λευκή και φαιά ουσία) εγκεφαλικό ιστό, ορίζεται όπως στην (3), ενώ ο συντελεστής αναπαραγωγής $\rho(t)$, ο οποίος περιγράφει τον ρυθμό μεταβολής του αριθμού των καρκινικών κυττάρων, ορίζεται από την σχέση

$$\rho(t) = \rho_G(t) - R(t) - C(t)$$

όπου όροι $R(t)$ και $C(t)$ αναφέρονται σε πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας, αντίστοιχα, και περιγράφονται με λεπτομέρεια στη Τελική Τεχνική

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Έκθεση της Δράσης 4.2. Οι βασικές εξισώσεις του προβλήματος και οι απαραίτητοι μετασχηματισμοί για την εφαρμογή της μεθόδου Φωκά συνοψίζονται στο διάγραμμα που ακολουθεί.



Το πρωτόκολλο θεραπείας, που θα χρησιμοποιήσουμε στα αριθμητικά παραδείγματα της επόμενης παραγράφου, χαρακτηρίζεται από τις ακόλουθες χρονικές περιόδους:

- περίοδος χωρίς θεραπεία: $t \in (0, T_G]$,
- περίοδος με ραδιοθεραπεία: $t \in (T_G, T_R]$,
- περίοδος συνδυασμού ράδιο-χημειοθεραπείας: $t \in (T_R, T_M]$,
- περίοδος με χημειοθεραπεία: $t \in (T_M, T_M]$ και

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- περίοδος χωρίς θεραπεία: $t \in (T_N, T_F]$

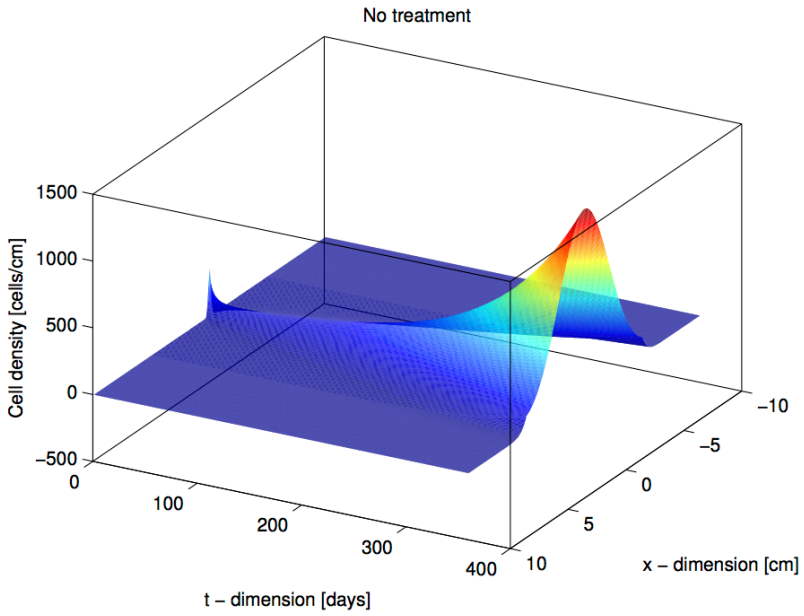
όπου

$$0 < T_G < T_R < T_M < T_N < T_F. \tag{64}$$

Για την αριθμητική μελέτη της συμπεριφοράς της μεθόδου Φωκά για προβλήματα εξέλιξης καρκινικών όγκων, η οποία επηρεάζεται από διάφορα πρωτόκολλα θεραπείας, παρουσιάζουμε, στις παραγράφους που ακολουθούν, αριθμητικά αποτελέσματα από ιατρικά προβλήματα μοντέλα που έχουν συμπεριληφθεί και περιγράφονται αναλυτικά στην Τελική Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.2 [12] (και ως εκ τούτου η περιγραφή τους παραλείπεται).

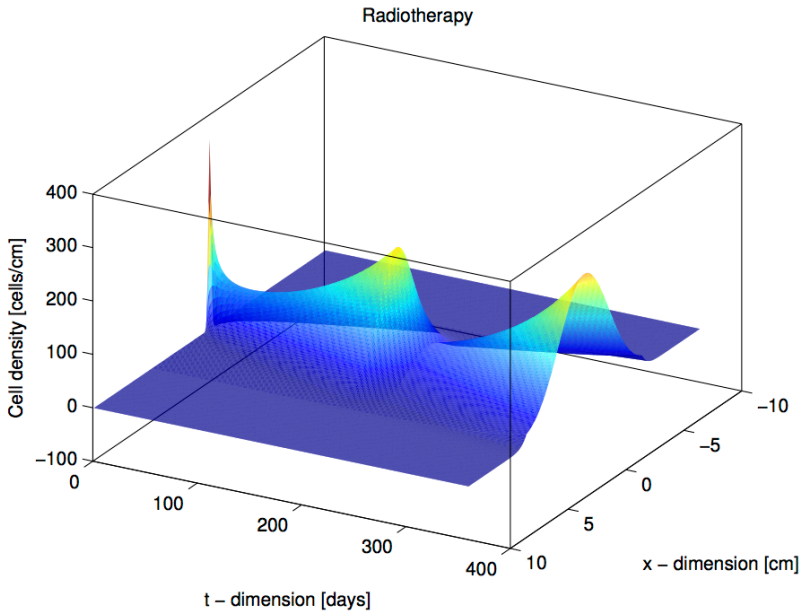
3.0.2 Αριθμητικά αποτελέσματα

Με στόχο τη μελέτη συμπεριφοράς των αριθμητικών μεθόδων ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούμε για την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης (52), παραθέτουμε καταρχήν τα Σχήματα 6-8 στα οποία επιδεικνύουμε την χρονική εξέλιξη μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων με εφαρμογή τριών διαφορετικών πρωτοκόλλων θεραπείας (1. εκθετική αύξηση χωρίς θεραπεία σχ. 6, 2. εφαρμογή πρωτοκόλλου ραδιοθεραπείας σχ. 7, 3. συνδυασμός πρωτοκόλλων ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας 8). Τα σχήματα αναφέρονται στο πρόβλημα I της Τελικής Τεχνικής Έκθεσης της Δράσης 4.2 [12].

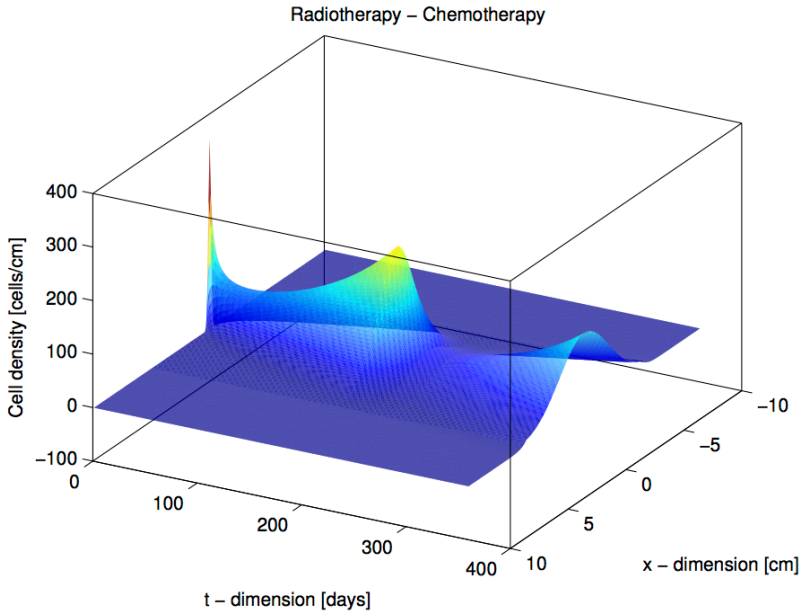


Σχήμα 6: Η χρονική εξέλιξη της λύσης χωρίς την εφαρμογή πρωτοκόλλων θεραπείας.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 7: Η χρονική εξέλιξη της λύσης με εφαρμογή πρωτοκόλλου ραδιοθεραπείας.



Σχήμα 8: Η χρονική εξέλιξη της λύσης με εφαρμογή συνδυασμού πρωτοκόλλων ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας.

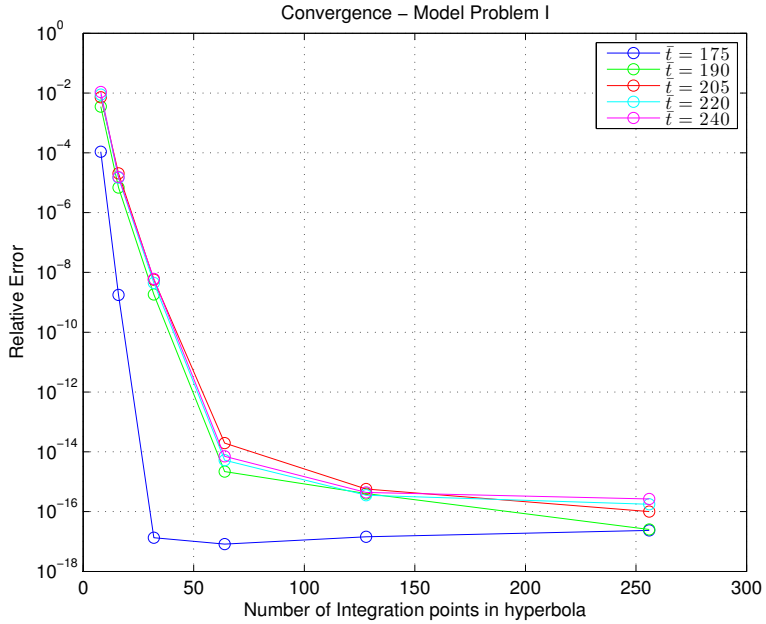
Ας συμβολίσουμε τώρα με C_N το διάνυσμα που περιέχει τις αριθμητικές προ-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

σεγγίσεις της λύση $\bar{c}(\bar{x}_i, \bar{t})$ σε ένα ικανό πλήθος χωρικών σημείων $\bar{x}_i$ in $[\bar{a}, \bar{b}]$. Το N δηλώνει το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούνται στον κανόνα του τραπεζίου, για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων $I_{\partial\Gamma+}$ and $I_{\partial\Gamma-}$ στις (55) και (56), και στον Gaussian ή στον Clenshaw-Curtis κανόνα για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος $I^{\ell}_{(-\infty,\infty)}$ στο (53). Ορίζουμε ακόμα το σχετικό σφάλμα E_N, σε σχέση με το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης, ως:

$$E_N := \frac{\|C_N - C_{2N}\|_\infty}{\|C_{2N}\|_\infty}. \tag{65}$$

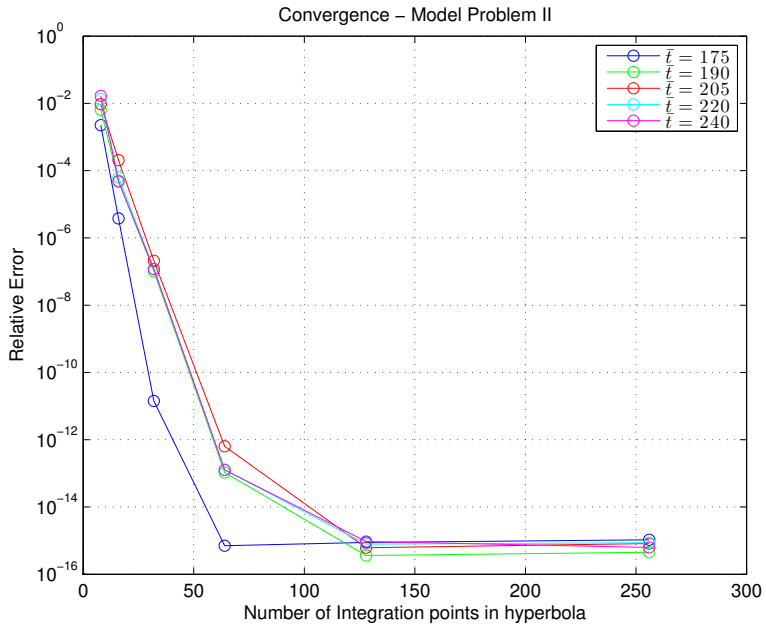
Υπενθυμίζουμε ότι για $\ell = 1$ το ολοκλήρωμα $I^{\ell}_{(-\infty,\infty)}$ υπολογίζεται αναλυτικά χρησιμοποιώντας την σχέση (61). Σε αυτή την περίπτωση, η εκθετική σύγκλιση του κανόνα του τραπεζίου στα υπερβολικά μονοπάτια φαίνεται, για τα προβλήματα I και II της Τελικής Τεχνικής Έκθεσης της Δράσης 4.2 [12], στα σχήματα 9 και 10.



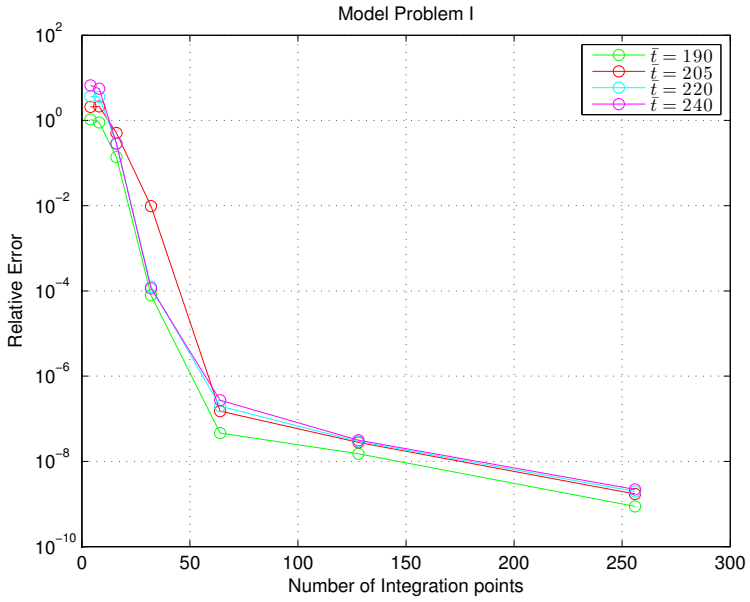
Σχήμα 9: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα του τραπεζίου για το πρόβλημα I.

Για $\ell \neq 1$ το ολοκλήρωμα $I^{\ell}_{(-\infty,\infty)}$ υπολογίζεται αριθμητικά κάνοντας χρήση της σχέσης (63). Το αριθμητικό σφάλμα για τον υπολογισμό του $I^{\ell}_{(-\infty,\infty)}$ κυριαρχεί στο συνολικό σφάλμα και φαίνεται στα σχήματα 11 και 12 στην περίπτωση της Gaussian ολοκλήρωσης και στα σχήματα 13 και 14 στην περίπτωση που χρησιμοποιείται ο κανόνας Clenshaw-Curtis. Οι αποδόσεις των δυο σχημάτων είναι παρόμοιες αλλά μικρότερες από την περίπτωση του κανόνα του τραπεζίου στα υπερβολικά μονοπάτια για $\ell = 1$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

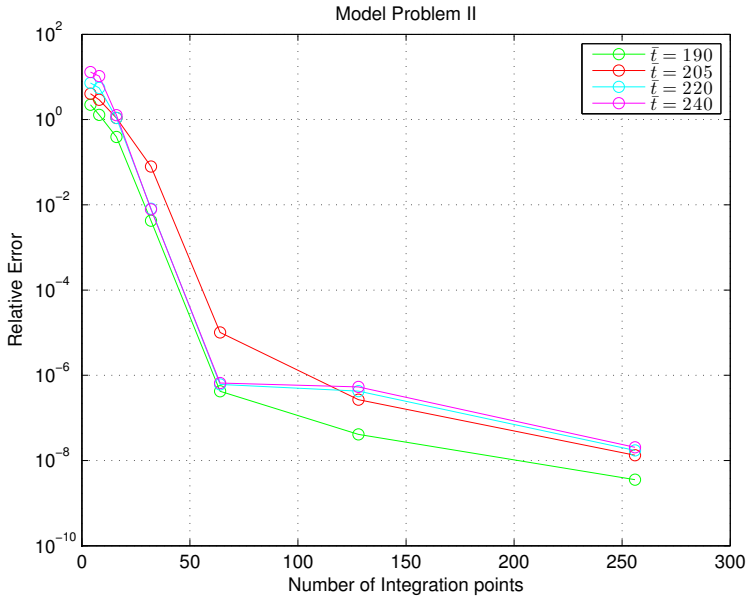


Σχήμα 10: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα του τραπεζίου για το πρόβλημα II.

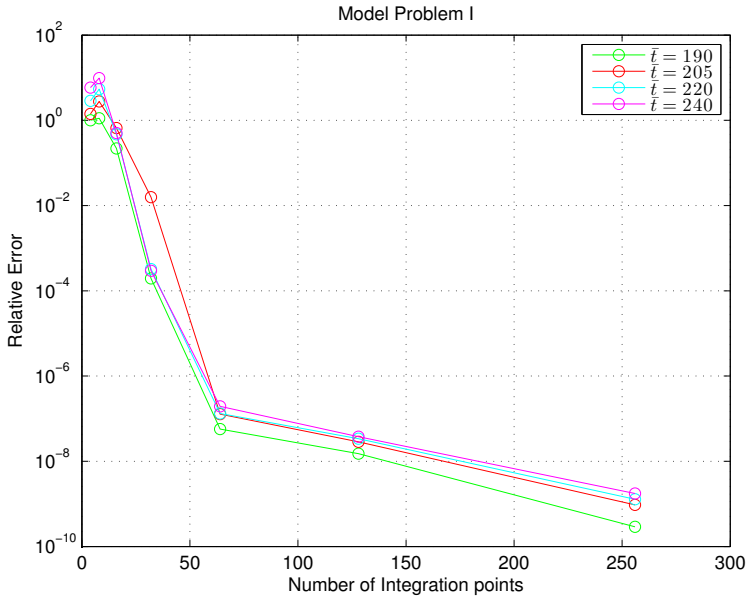


Σχήμα 11: Καμπύλες σύγκλισης για τον Gaussian κανόνα για το πρόβλημα I.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

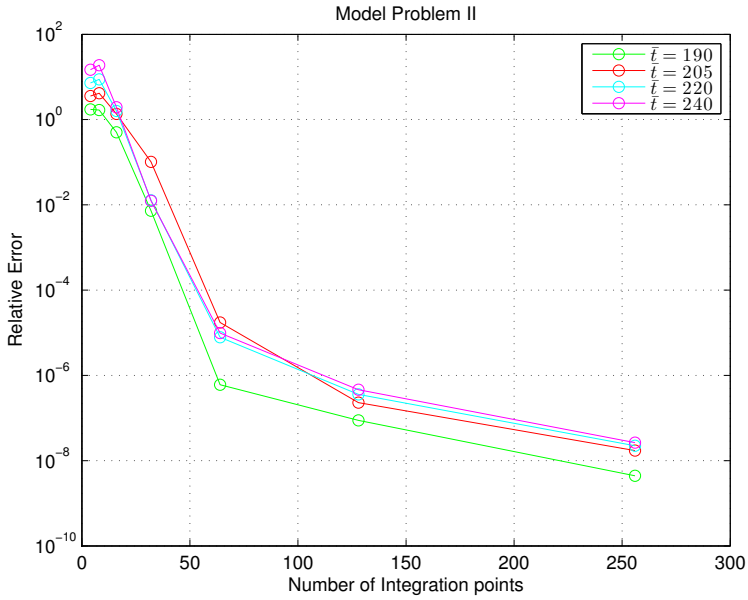


Σχήμα 12: Καμπύλες σύγκλισης για τον Gaussian κανόνα για το πρόβλημα II.



Σχήμα 13: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα Clenshaw-Curtis για το πρόβλημα I.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 14: Καμπύλες σύγκλισης για τον κανόνα Clenshaw-Curtis για το πρόβλημα II.

4 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 4 επιστημονικά άρθρα σε διεθνή περιοδικά και σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:
  - D. Mantzavinos, M. Papadomanolaki, Y.G. Saridakis and A.G. Sifalakis, *Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1 + 1 dimensions*, J. Applied Numerical Mathematics (2014), in press, http:/dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2014.09.006
  - M. Asvestas, A.G. Sifalakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012143
  - M. Asvestas, E.P. Papadopoulou, A.G. Sifalakis and Y.G. Saridakis, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems*

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

with Discontinuous Time Dependent Parameters, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015 Vol I, pp 1-6, WCE 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K.

- A.S. Fokas, A. Alexandrou-Himonas and D. Mantzavinos, *The Nonlinear Schrödinger equation on the half line*, Transactions of AMS, (accepted 2015)

Σημειώνουμε επίσης στα πλαίσια του έργου έχουν συγκαταλέγονται και τα επιστημονικά άρθρα:

- A.G. Sifalakis, M. Papadomanolaki, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *The Fokas method for heterogeneous reaction-diffusion brain toumors that incorporate Radiotherapy and Chemotherapy*, (submitted 2015)
- D. Mantzavinos and A.S. Fokas, *The Unified Transform For The Heat Equation: II. Non-Separable Boundary Conditions In Two Dimensions*, European J Applied Math, 2015 (http://dx.doi.org/10.1017/S0956792-515000224).

• Ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η μεταπτυχιακή διατριβή:

- Μ. Ασβεστάς, "Εφαρμογή της μεθόδου Φωκά στο μαθηματικό μοντέλο διάχυσης των καρκινικών κυττάρων σε n+1 εγκεφαλικές περιοχές", Μεταπτυχιακή Διατριβή 2013

5 Συνεργασίες

Η ερευνητική δραστηριότητα της παρούσα δράσης πραγματοποιήθηκε από την ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Α. Σηφαλάκη, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη σε συνεργασία με τον μετακαλούμενο Έλληνα του εξωτερικού καθηγητή Α. Φωκά (Πανεπιστήμιο Cambridge) και τον ερευνητή Δ. Μαντζαβίνο (Πανεπιστήμιο Notre Dame). Στα πλαίσια του έργου συνεργάστηκε και ολοκλήρωσε την ερευνητική διατριβή του ο μεταπτυχιακός φοιτητής Μ. Ασβεστάς.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ολοκληρώσει πλήρως την ανάπτυξη της μεθόδου για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 διαστάσεις, οι άμεσοι μελλοντικοί μας στόχοι περιλαμβάνουν την επέκταση της μελέτης της μεθόδου Φωκά σε εξελικτικά

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

προβλήματα πολλαπλών χωρικών πεδίων στις δύο χωρικές διαστάσεις καθώς και σε ολοκληρώσιμα γραμμικοποιήσιμα μη-γραμμικά προβλήματα.

Αναφορές

[1] Μ. Ασβεστάς, Ε. Π. Παπαδοπούλου, Α. Γ. Σηφαλάκης, και Ι. Γ. Σαριδάκης, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with Discontinuous Time Dependent Parameters*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015.

[2] Cook J, Woodward DE, Tracqui P και Murray JD (1995) *Resection of gliomas and life expectancy*, J Neurooncol., 24, 131.

[3] Corwin, David AND Holdsworth, Clay AND Rockne, Russell C. AND Trister, Andrew D. AND Mrugala, Maciej M. AND Rockhill, Jason K. AND Stewart, Robert D. AND Phillips, Mark AND Swanson, Kristin R. *Toward Patient-Specific, Biologically Optimized Radiation Therapy Plans for the Treatment of Glioblastoma*, PLoS ONE, 8, 2013.

[4] Flyer N και Fokas AS *A hybrid analytical-numerical method for solving evolution partial differential equations I: The half-line*, Proc. R. Soc. A, 464, 1823-1849, 2008.

[5] R. Rockne, E. C. Alvord Jr., J. K. Rockhill and K. R. Swanson, *A mathematical model for brain tumor response to radiation therapy*, J. Math. Biol., 58, 561–578, 2009.

[6] Mantzavinos D, Papadomanolaki MG, Saridakis YG και Sifalakis AG *A novel transform approach for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions*, (submitted) 2013

[7] M.G. Papadomanolaki *PhD Thesis*, Technical University of Crete,

[8] Weideman J.A.C και Trefethen L.N. *Parabolic and hyperbolic contours for computing the bromwich integral*, Math. Comp., 76(259), 1341–1356, 2007

[9] T.S. Papatheodorou και A.N.Kandili Novel numerical techniques based on Fokas transforms, for the solution of initial boundary value problems,*Journal of Computational and Applied Mathematics 227:75-82*,2009.

[10] K. R. Swanson, *Mathematical modeling of the growth and control of tumors*, PHD Thesis, University of Washington, 1999.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[11] G. Powathil, M. Kohandel, S. Sivaloganathan, A. Oza and M. Milosevic, *Mathematical modeling of brain tumors: effects of radiotherapy and chemotherapy*,Phys. Med. Biol. 52 :3291-3306, 2007.

[12] MATENVMED- MIS 379416, Δράση 4.2: Τεχνική Έκθεση 2015.

[13] MATENVMED- MIS 379416, Δράση 2.4: Τεχνική Έκθεση 2014.

[14] Tracqui P, Cruywagen GC, Woodward DE, Bartoo GT, Murray JD, Alvord Jr EC (1995) *A mathematical model of glioma growth: the effect of chemotherapy on spatio-temporal growth*, Cell Prolif, 28 17–31.

[15] L.N. Trefethen, J.A.C Weideman, T.Schmelzer *Tablot quadratures and rational approximations*, *BIT Numerical Mathematics, 46:653-670*, 2006.

[16] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,και E.C.Alvord Jr. A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection, *Cell Proliferation,29:269-288*, 1996.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Ε΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 3.1

Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας Περιεχομένων

1. ΣΚΟΠΟΣ 4

1.1. Δράση 3.1: Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud 4

2. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ 5

2.1. Έρευνα Πεδίου σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές 5

2.1.1. Εισαγωγή 5

2.2. Δοκιμαστική εγκατάσταση και λειτουργία πλατφόρμας FEniCS 7

2.3. Μέθοδοι Χαλάρωσης στη Διεπαφή 7

2.3.1. Εισαγωγή 7

2.3.2. Διακριτοποίηση πεδίου με επαναληπτική χαλάρωση στις διεπαφές 8

2.4 Εφαρμογή ενός υβριδικού παράλληλου Monte Carlo επιλυτή ΜΔΕ σε ορθογώνια πολλαπλά πεδία 10

2.4.1. Εισαγωγή 10

2.4.2. Ανάλυση βασικού αλγορίθμου 11

2.5 Υλοποίηση Μεθόδων IR στη FEniCS 13

2.5.1. Εισαγωγή 13

2.5.2. FEniCS 14

2.5.3. RabbitMQ 15

2.5.4. Σειριακή Υλοποίηση 15

2.5.5. Παράλληλη Υλοποίηση 16

2.6 Ασύγχρονη Μέθοδος Χαλάρωσης Διεπαφών 16

2.6.1. Εισαγωγή 16

2.6.2. Σειριακός αλγόριθμος 16

2.6.3. Σύγχρονος παράλληλος αλγόριθμος 17

2.6.4. Ασύγχρονος παράλληλος αλγόριθμος 17

2.7 Παραλληλοποίηση Alopex 17

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΠΑΡΑΛΛΗΛΗΣ ΥΛΟΠΟΙΗΣΗΣ ΑΛΓΟΡΙΘΜΩΝ 18

3.1. Μέθοδοι χαλάρωσης στη Διεπαφή 18

3.1.1. Πειράματα 19

3.2. Εφαρμογή Υβριδικού Παράλληλου Monte Carlo Επιλυτή Μ.Δ.Ε. 22

3.2.1. Πειραματικά αποτελέσματα 22

3.2.2. Συμπεράσματα 25

3.3. Αποτελέσματα Ασύγχρονης Υλοποίησης IR Μεθόδων 26

4. ΠΑΡΑΔΟΤΕΑ 28

α. Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud 29

5. ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ 30

6. ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΕΙΣ 30

7. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 30

1. Σκοπός

Η Δράση 3 αναφέρεται γενικά στη χρήση σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών αφενός μεν στην υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων και του αντίστοιχου επιστημονικού λογισμικού, που θα αναπτυχθούν στα πλαίσια της Δράσης 2 (ιδιαίτερα 2.2 και 2.3), αφετέρου δε στην ανάπτυξη της πλατφόρμας λογισμικού της Δράσης 4. Η υλοποίησή του πραγματοποιείται από δύο διαφορετικές δράσεις (3.1 και 3.2), ανάλογα με την κατηγορία αρχιτεκτονικών που χρησιμοποιούνται. Η ΚΕΟ3 έχει αναλάβει την δράση 3.1: Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud και η ΚΕΟ2 την δράση 3.2: Υλοποίηση σε FPGAs.

1.1. Δράση 3.1: Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud

Αντικείμενο της συγκεκριμένης δράσης αποτελεί η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες παράλληλες αρχιτεκτονικές.

Αρχικά η υλοποίηση έλαβε χώρα σε επίπεδο συστοιχιών υπολογιστών (Clusters). Η υλοποίηση των μεθόδων αφορά τόσο σε ομοιογενή, συμμετρικά σχήματα όπου γίνεται χρήση ενός συγκεκριμένου προγραμματιστικού μοντέλου ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI), όσο και σε ετερογενή, μη συμμετρικά σχήματα, όπου ο παραλληλισμός των μεθόδων επιτελείται σε πολλαπλά επίπεδα. Σύμφωνα με αυτά τα συνεργατικά σχήματα εφαρμόστηκε συνδυασμός μοντέλων ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI) με μοντέλα προγραμματισμού κοινής μνήμης (OpenMP, Pthreads) για την περισσότερο ευέλικτη αξιοποίηση των επεξεργαστών πολλαπλών πυρήνων που περιέχονται σε κάθε κόμβο του Cluster.

Κατά το επόμενο στάδιο της συγκεκριμένης δράσης η υλοποίηση έγινε σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (web services). Στη περίπτωση αυτή το παρεχόμενο λογισμικό είναι σε θέση να αξιοποιεί με καλύτερο τρόπο τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, ιδιαίτερα κατά την περίπτωση όπου υποβάλλονται μέσω του Cloud αιτήσεις για παράλληλη εκτέλεση από περισσότερους του ενός χρήστες. Για το λόγο αυτό στη δράση 4.1 υλοποιήθηκε το μοντέλο Λογισμικό σαν Υπηρεσία (**SaaS** – **S**oftware **a**s **a** **S**ervice), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδικτυακού γραφικού περιβάλλοντος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές. Επιπλέον, για να ληφθεί υπόψη η ποικιλομορφία των υποπροβλημάτων για ένα δοθέν πρόβλημα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλής φυσικής, η προτεινόμενη εφαρμογή έχει τη δυνατότητα να υπολογίσει και να παρέχει τα βέλτιστα VMs (σε πλήθος και δυνατότητες) σύμφωνα με τους διαθέσιμους πόρους, το μέγεθος του συνολικού προβλήματος και το μέγεθος των υποπροβλημάτων του.

Σημείωση: Στο Τεχνικό Δελτίο Έργου στη συγκεκριμένη Δράση προβλεπόταν η υλοποίηση σε Grids ή εναλλακτικά σε περιβάλλον Cloud, εφόσον αυτό είχε ωριμάσει. Επειδή κατά την περίοδο υλοποίησης του έργου η Cloud τεχνολογία είχε ήδη εφαρμοστεί με επιτυχία, αποφασίστηκε η υλοποίηση σε αυτό το υπολογιστικό περιβάλλον.

2. Μεθοδολογία

2.1. Έρευνα Πεδίου σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές

2.1.1. Εισαγωγή

Με την έναρξη του έργου, έγινε ανασκόπηση της διεθνούς βιβλιογραφίας και μελέτη των μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων /πολλαπλής φυσικής (Multi Domain / Multi Physics) προκειμένου τα μέλη της ΚΕΟ3 να αποκτήσουν το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο κατανόησης των αριθμητικών μεθόδων επίλυσης, οι οποίες θα υλοποιηθούν στα παραπάνω περιβάλλοντα. Επίσης, μελετήθηκαν οι μέθοδοι Collocation και Μετασχηματισμού Φωκά.

Ακολούθησε η ανασκόπηση λογισμικού ανοικτού (ελεύθερου) κώδικα (Open Source) αφενός για γλώσσες προγραμματισμού για παράλληλη υλοποίηση και αφετέρου για πλατφόρμες λογισμικού, που διαθέτουν υλοποιημένα εργαλεία για επίλυση PDEs και άλλες αριθμητικές μεθόδους.

Η ανασκόπηση της βιβλιογραφίας έδειξε ότι έχουν υλοποιηθεί δύο βασικές εκδόσεις στην παράλληλη εκτέλεση προγραμμάτων: Fork-Join Style (που επιτυγχάνει και Nested Parallelism) και SPMD style (Single program, multiple data).

Τα βασικά μοντέλα παράλληλου προγραμματισμού, για τα οποία υπάρχουν διαθέσιμες υλοποιήσεις ελεύθερου λογισμικού, είναι τα ακόλουθα [1]: Parallel Random Access Machine, Unrestricted Message Passing, Asynchronous Shared Memory and Partitioned Global Address Space, Data Parallel Models, Task Parallel Models and Task Graphs.

Τέλος έχει αναπτυχθεί και υλοποιηθεί, μια πληθώρα από γλώσσες προγραμματισμού, για αρχιτεκτονικές παράλληλης επεξεργασίας, όπως η C*, Occam, PVM, HPF, Linda, αλλά και πολλές ερευνητικές προτάσεις όπως Orca, PCN, CC++, P3L, BSP language. Μεταξύ των γλωσσών ελεύθερου λογισμικού, είναι η OpenCL, η οποία έχει καθιερωθεί σαν το Open Standard για παράλληλο υπολογισμό σε ετερογενή συστήματα. Επίσης η OpenCL μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μια μεγάλη ποικιλία από πολύ-πύρηνα συστήματα και έχει τη δυνατότητα κλιμάκωσης (scaling). Μια νέα γλώσσα παράλληλου προγραμματισμού είναι η ParaSail, που μοιάζει με μια τροποποίηση της Java ή της C#. Η διαφορά είναι ότι διαμερίζει αυτόματα ένα πρόγραμμα σε χιλιάδες άλλες εργασίες, οι οποίες μπορούν τότε να διαχυθούν σε διάφορους πυρήνες, ένα τέχνασμα που λέγεται pico-threading, το οποίο μεγιστοποιεί τον αριθμό των εργασιών που μπορούν να εκτελεστούν παράλληλα, ανεξάρτητα από τον αριθμό των πυρήνων. Η ParaSail κάνει επίσης αυτόματη αποσφαλμάτωση (debugging), που κάνει τον κώδικα πιο ασφαλή. Παρόλα αυτά είναι σχετικά νέα έκδοση και στην ανασκόπηση εντοπίστηκε ότι έχει ακόμη κάποια bugs.

Συνοψίζοντας, το μέλλον του υπολογισμού σε παράλληλα περιβάλλοντα υπαγορεύεται από τις φυσικές και τεχνικές ανάγκες. Οι παράλληλοι υπολογιστές γίνονται περισσότερο υβριδικοί, συνδυάζοντας πολυνηματικό υλικό, πολλαπλούς πυρήνες, μονάδες SIMD, επιταχυντές και on-chip συστήματα επικοινωνίας.

Η τελική επιλογή του μοντέλου θα γίνει σε συνδυασμό με την πολυπλοκότητα των λύσεων του προβλήματος πολλαπλών πεδίων, αλλά και τη μεταφερσιμότητα σε περιβάλλοντα Clusters, GRIDS και Cloud Computing.

Λαμβάνοντας υπ' όψιν τις παραδοσιακές προσεγγίσεις από τους χώρους της παράλληλης επεξεργασίας και των παράλληλων αρχιτεκτονικών μπορούμε να εντοπίσουμε αρκετά μειονεκτήματα των clusters [2]. Από την εμπειρία μας, έχουμε διαπιστώσει πόσο κρίσιμοι παράγοντες είναι η καθυστέρηση και το εύρος ζώνης του διασυνδετικού δικτύου, πόσο χρήσιμη είναι η κοινόχρηστη μνήμη και πόσο αναγκαίο το ελαφρύ λογισμικό ελέγχου. Σε αυτά τα σημεία, τα clusters υστερούν συγκριτικά με τα συμβατικά παράλληλα συστήματα, όπου το διασυνδετικό δίκτυο είναι υψηλότερων επιδόσεων, η κοινή μνήμη, ο καθολικός συγχρονισμός και η διατήρηση της συνοχής της κρυφής μνήμης υλοποιούνται με υλικό, υπερτερώντας σε σχέση με την αντίστοιχη υλοποίηση με λογισμικό, ενώ τέλος το ειδικού τύπου λογισμικό που μπορεί να ελέγχει κάθε κόμβο καταναλώνει λιγότερη μνήμη και αντιδρά πιο γρήγορα από το πλήρες και αυτόνομο λειτουργικό σύστημα που ελέγχει κάθε κόμβο του cluster. Λόγω των παραπάνω μειονεκτημάτων, τα clusters αποδεικνύονται ακατάλληλα για ορισμένες εφαρμογές. Σε πολλές ωστόσο περιπτώσεις, χρησιμοποιώντας νέες αλγοριθμικές τεχνικές που δεν εξαρτώνται τόσο από την γρήγορη επικοινωνία των κόμβων, τα clusters μπορούν να ανταγωνιστούν σε επιδόσεις παράλληλα συστήματα πολύ υψηλότερου κόστους.

Το σημαντικότερο πλεονέκτημα των clusters είναι ότι χρησιμοποιούνται τεχνολογίες υλικού και λογισμικού ευρείας χρήσης. Τόσο τα δίκτυα σταθμών εργασίας, όσο και οι συστάδες προσωπικών υπολογιστών της τάξης Beowulf άνθισαν διότι δεν απαιτούσαν δαπανηρά και μακροπρόθεσμα σχέδια μέχρι να αρχίσουν να αποδίδουν. Το χαρακτηριστικό αυτό οδηγεί προφανώς και σε ένα σαφές πλεονέκτημα κόστους. Συνεπώς ο λόγος κόστους προς απόδοση των clusters μπορεί να υπερτερεί του αντίστοιχου των παραδοσιακών υπερυπολογιστών για εφαρμογές που δεν απαιτούν επικοινωνία υψηλού εύρους ζώνης και χαμηλής καθυστέρησης.

Ένα άλλο σημείο υπεροχής των εμπορικών συστάδων υπολογιστών σε σχέση με τις κλασικές παράλληλες μηχανές, είναι η ευελιξία και η παραμετροποιησιμότητά τους. Ο αριθμός των κόμβων, η χωρητικότητα μνήμης ανά κόμβο, ο αριθμός των επεξεργαστών ανά κόμβο και η τοπολογία του διασυνδετικού δικτύου είναι δομικές παράμετροι που μπορούν να καθοριστούν με μεγάλη λεπτομέρεια και για κάθε cluster ξεχωριστά. Επιπλέον, η δομή του συστήματος μπορεί να αλλάζει ή να επεκτείνεται αξιοποιώντας την ήδη υπάρχουσα υποδομή. Ο εκτεταμένος αυτός έλεγχος στη δομή του συστήματος ωφελεί τόσο τους χρήστες, που μπορούν να έχουν κάθε στιγμή αυτό που επιθυμούν, όσο και τους κατασκευαστές, που μπορούν να καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα απαιτήσεων επιδόσεων ή κόστους.

Τέλος, οι εμπορικές συστάδες υπολογιστών μπορούν να ενσωματώνουν γρήγορα τεχνολογικές εξελίξεις που χρησιμοποιούνται μαζικά. Νέοι τύποι επεξεργαστών, μνημών, δίσκων και δικτύων κατασκευάζονται διαρκώς για τους προσωπικούς υπολογιστές, επιτρέποντας και στα clusters να επωφελούνται από τις προόδους αυτές. Τα clusters επιπλέον επωφελούνται από πτώσεις τιμών λόγω τις μαζικής παραγωγής των εξαρτημάτων προσωπικών υπολογιστών. Συνολικά θα λέγαμε ότι αν και τα clusters υπολογιστών δεν επιτυγχάνουν πάντα επιδόσεις αντάξιες κορυφαίων παράλληλων μηχανών, το χαμηλό τους κόστος και η ευελιξία που προσφέρουν τα καθιστά σαφώς ανταγωνιστικά.

Ένας blade server [3],[4] είναι ένας απογυμνωμένος server με τμηματική σχεδίαση βελτιστοποιημένος για να ελαχιστοποιήσει τη χρήση φυσικού χώρου και ενέργειας. Ενώ ένας τυπικός rack-mount server μπορεί να λειτουργήσει τουλάχιστον με ένα καλώδιο ρεύματος και ένα καλώδιο ισχύος, στους blade servers έχουν αφαιρεθεί πολλά συστατικά για να εξοικονομήσουν χώρο, να ελαχιστοποιήσουν την κατανάλωση ισχύος, αλλά εξακολουθούν να έχουν όλα εκείνα τα λειτουργικά

συστατικά για να θεωρούνται υπολογιστές. Ένα blade enclosure που μπορεί να στηρίζει πολλαπλούς blade servers παρέχει υπηρεσίες, όπως ρεύμα, ψύξη, δικτύωση και διαχείριση.

2.2. Δοκιμαστική εγκατάσταση και λειτουργία πλατφόρμας FEniCS

Το project FEniCS [5] είναι μια συλλογή από δωρεάν, ανοιχτού κώδικα, στοιχεία λογισμικού με κοινό στόχο να καταστεί δυνατή αυτοματοποιημένη επίλυση των διαφορικών εξισώσεων. Τα στοιχεία που το απαρτίζουν παρέχουν εργαλεία επιστημονικού υπολογισμού για εργασία με υπολογιστικά πλέγματα, πεπερασμένων στοιχείων μεταβολικές διατυπώσεις για διαφορικές εξισώσεις και μερικές διαφορικές εξισώσεις καθώς επίσης για αριθμητική γραμμική άλγεβρα. Η τρέχουσα σταθερή έκδοση του FEniCS Project είναι η 1.1 η οποία και κυκλοφόρησε τον 7 Ιανουαρίου του 2013. Για τις ανάγκες του έργου, η παραπάνω έκδοση εγκαταστάθηκε σε server του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων, όπου έγινε η δοκιμαστική λειτουργία της, με τα έτοιμα demo/παραδείγματα που περιέχει.

2.3. Μέθοδοι Χαλάρωσης στη Διεπαφή

2.3.1. Εισαγωγή

Οι διάφορες μέθοδοι διακριτοποίησης πεδίου που έχουν πρόσφατα αναπτυχθεί για την αποδοτική επίλυση ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων μπορούν εύκολα να ταξινομηθούν σε δύο κατηγορίες: επικαλυπτόμενες και μη επικαλυπτόμενες. Και οι δύο προσεγγίσεις έχουν ήδη χρησιμοποιηθεί για να μοντελοποιήσουν αποτελεσματικά μεγάλης κλίμακας, βιομηχανικά, προβληματικών συνθηκών προβλήματα. Παρόλα αυτά θεωρείται ότι απαιτείται επιπλέον θεωρητική και πειραματική ανάλυση ώστε να γίνουν πρακτικές αυτές οι μέθοδοι και χρήσιμα εργαλεία για τους μη ειδήμονες.

Τα επικαλυπτόμενα (Schwartz) σχήματα έχουν στο παρελθόν λάβει μεγάλη προσοχή. Άρθρα που κάνουν ανασκόπηση και συγκρίνουν διάφορα τέτοια σχήματα [1] και ερευνούν τις σχετιζόμενες στρατηγικές preconditioning [2, 3] υπάρχουν ήδη στη βιβλιογραφία. Σχετικά πρόσφατα ένας αριθμός μελετών έχουν δείξει ότι τα μη επικαλυπτόμενα σχήματα μπορούν να συμπεριφερθούν καλά και μπορούν πιθανά να ελευθερώσουν τους χρήστες από συγκεκριμένες πολυπλοκότητες στη διατύπωση και στην υλοποίησή τους. Η σύγκριση των κυριότερων χαρακτηριστικών αυτών των δύο κατηγοριών μεθόδων και η ύπαρξη σχέσεων ισοδυναμίας ανάμεσά τους έχει ήδη μελετηθεί αρκετά [4, 5, 6].

Οι μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή μας πάνε ένα βήμα παραπέρα από τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους διακριτοποίησης πεδίου [7]. Σε μια προσπάθεια να μιμηθούν τη φυσική του προβλήματος στον πραγματικό κόσμο, σπάνε μια πολύπλοκη μερική διαφορική εξίσωση (ΜΔΕ) που δρα σε ένα μεγάλο ή/και πολύπλοκο πεδίο σε ένα σύνολο προβλημάτων ΜΔΕ με διαφορετικούς αλλά απλούς τελεστές που δρουν σε διαφορετικά μικρότερα και εύκολα υποπεδία. Το πολλαπλών πεδίων, πολλαπλών ΜΔΕ σύστημα είναι σωστά συζευγμένο χρησιμοποιώντας τελεστές εξομάλυνσης στα όρια μεταξύ των υποπεδίων.

Από την οπτική της χαλάρωσης στη διεπαφή αυτές οι μέθοδοι αποτελούνται από τη διαμέριση του πεδίου σε ένα σύνολο από μη επικαλυπτόμενα υποπεδία και

από την επιβολή κάποιων οριακών συνθηκών στα όρια των διεπαφών που ορίζονται από αυτήν τη διαμέριση. Στη συνέχεια χρησιμοποιώντας αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές επιλύεται το σύνολο των συνεπαγόμενων προβλημάτων ΜΔΕ. Οι λύσεις που προκύπτουν δεν ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες των διεπαφών και εφαρμόζεται χαλάρωση στις διεπαφές για να αποκτήσουμε νέες τιμές στα όρια των διεπαφών, που να ικανοποιούν καλύτερα τις συνθήκες και λύνουμε τις ΜΔΕ με αυτές τις νέες τιμές. Τα παραπάνω βήματα επαναλαμβάνονται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

Οι δύο μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή που επελέγησαν ως πλέον κατάλληλες για τις ανάγκες του έργου είναι οι δύο παρακάτω:

- **GEO** Μια μέθοδος που βασίζεται σε μια απλή γεωμετρική συστολή.
- **ROB** Ένας αλγόριθμος που χρησιμοποιεί τις Robin συνθήκες στις διεπαφές για εξομάλυνση.

2.3.2. Διακριτοποίηση πεδίου με επαναληπτική χαλάρωση στις διεπαφές

Επί του παρόντος, ο χώρος της διακριτοποίησης πεδίου αποτελείται από δύο μέρη - τις επικαλυπτόμενες και τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους. Οι επικαλυπτόμενες – επίσης γνωστές και ως Schwartz – ήταν οι πρώτες που χρησιμοποιήθηκαν και έχουν αποδείξει ήδη ότι είναι πολύ αποδοτικές αριθμητικές διαδικασίες που χαίρουν συγκεκριμένων πολύ επιθυμητών ιδιοτήτων σύγκλισης. Παρ’ όλα αυτά, έχει επίσης παρατηρηθεί ότι έχουν διάφορα πολύ σημαντικά μειονεκτήματα που απαγορεύουν τη χρήση τους για συγκεκριμένες εφαρμογές. Για παράδειγμα, σχεδόν όλες εκ των πολλών προτεινόμενων μεθόδων διακριτοποίησης πεδίου για την επίλυση μοντέλων διάδοσης κυμάτων είναι είτε μη επικαλυπτόμενες, είτε χαλάρωσης στη διεπαφή [8, 9, 10, 11].

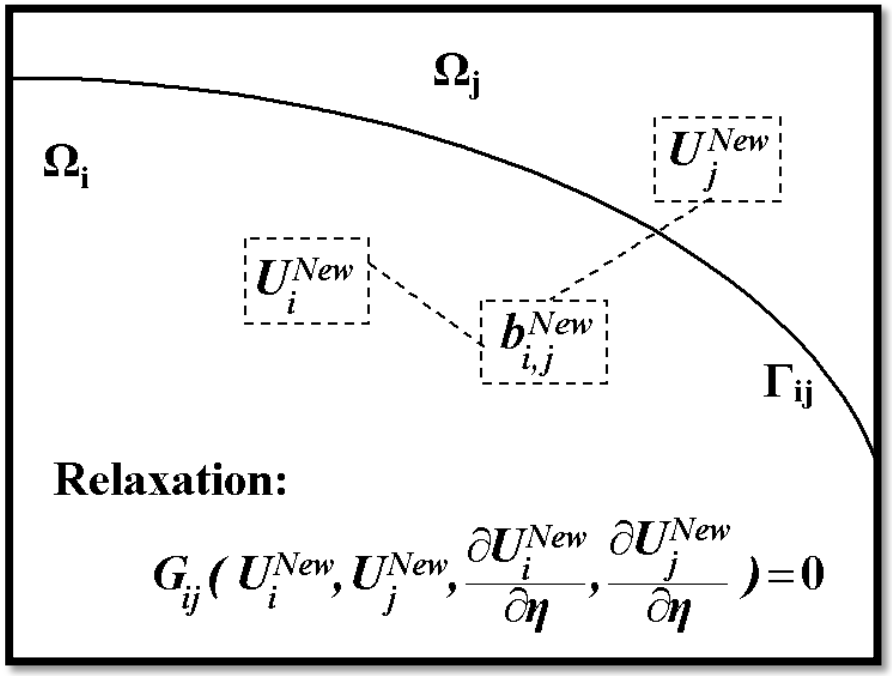
Οι μη επικαλυπτόμενες μέθοδοι παρουσιάζουν συγκεκριμένα πλεονεκτήματα σε σχέση με τις επικαλυπτόμενες. Πιο συγκεκριμένα:

- Δεν είναι ευαίσθητες σε άλματα στους συντελεστές του τελεστή. Η συμπεριφορά σύγκλισής τους και οι υπολογισμοί θεωρητικού σφάλματός τους παραμένουν ίδια ακόμα και αν ο διαφορικός τελεστής περιλαμβάνει ασυνεχείς συντελεστές, αρκεί τα άλματα να συμβαίνουν κατά μήκος των γραμμών των διεπαφών [12].
- Έχουν μικρότερο κόστος (επιβάρυνση) επικοινωνίας σε μια παράλληλη υλοποίηση σε κατανεμημένης μνήμης πολυεπεξεργαστικά συστήματα. Το κόστος της επικοινωνίας είναι αναλογικό με το μήκος των γραμμών των διεπαφών, τη στιγμή που στις επικαλυπτόμενες μεθόδους είναι αναλογικό με την επικαλυπτόμενη περιοχή [13].
- Η καταγραφή/συντήρηση είναι σχετικά ευκολότερη για τη διαμέριση και το χειρισμό των σχετικών δομών δεδομένων απ’ ότι στις πολύπλοκες και ακριβές επικαλυπτόμενες μεθόδους [13].

Υπάρχουν δύο κύριες οπτικές για τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους, το preconditioning και η χαλάρωση στη διεπαφή. Μια εις βάθος έρευνα για τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους διακριτοποίησης πεδίου αναλυμένες από την οπτική του preconditioning μπορεί να βρεθεί στο [14] και μια γενική διατύπωση και ανάλυση

των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή στο [15]. Για την αναγνώριση των κύριων χαρακτηριστικών τους, ακολουθεί μια σύντομη περιγραφή των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.

Η χαλάρωση στη διεπαφή είναι ένα βήμα πέρα από τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους (ακολουθώντας τη χαλάρωση του Southwell του 1930), αλλά στη ΜΔΕ αντί για το επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας, για να διατυπώσει τη χαλάρωση σαν επαναλαμβανόμενες διαδικασίες εξομάλυνσης της διεπαφής. Ένα σύνθετο φυσικό φαινόμενο αποτελείται από μια συλλογή απλών μερών με καθένα να υπακούει έναν μεμονωμένο φυσικό νόμο τοπικά και να μοιράζεται τις συνθήκες των διεπαφών του με γείτονες. Η χαλάρωση στη διεπαφή χωρίζει το πεδίο σε ένα σύνολο μη επικαλυπτόμενων πεδίων και επιβάλλει κάποιες οριακές συνθήκες στη διεπαφή ανάμεσα στις γραμμές των υποπεδίων. Δοθείσης μιας αρχικής μαντεψιάς, μιμείται τη φυσική του πραγματικού κόσμου επιλύοντας τα τοπικά προβλήματα ακριβώς σε κάθε υποπεδίο και χαλαρώνοντας τις οριακές τιμές για να πάρει καλύτερους υπολογισμούς των σωστών συνθηκών στη διεπαφή. Αυτή η διαδικασία παρουσιάζεται στην εικόνα 1, όπου ο γενικός τύπος χαλάρωσης $G_{i,j}$ (που βασίζεται στις τρέχουσες τοπικές λύσεις U_i^{New} και U_j^{New} των δύο γειτονικών υποπεδίων Ω_i και Ω_j) υπολογίζει διαδοχικές προσεγγίσεις της λύσης $b_{i,j}^{New}$ στη διεπαφή $\Gamma_{i,j}$ ανάμεσά τους.



Εικόνα 1: Ο μηχανισμός χαλάρωσης στη διεπαφή

Για την επίσημη περιγραφή της μεθόδου θεωρούμε το ακόλουθο πρόβλημα:

$$Du = f \ in \ \Omega, \qquad Bu = c \ on \ \partial\Omega \qquad (1)$$

όπου το D είναι ένας ελλειπτικός, μη γραμμικός γενικά, διαφορικός τελεστής και το B είναι ένας τελεστής συνθήκης που ορίζεται στο όριο $\partial\Omega$ ενός ανοιχτού πεδίου $\Omega \in R^d, d = 1, 2, \dots$. Αυτό το πεδίο διαμερίζεται σε p ανοιχτά υποπεδία $\Omega_i, i = 1, \dots, p$ τέτοια ώστε $\Omega = \bigcup_{i=1}^{p} \overline{\Omega_i} \setminus \partial\Omega$ και $\bigcap_{i=1}^{p} \Omega_i = \emptyset$. Για λόγους που σχετίζονται είτε με τα φυσικά χαρακτηριστικά του προβλήματος, είτε με τους

διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, κάποιος θα ήθελε να αντικαταστήσει την (1) με το ακόλουθο σύστημα χαλαρά συνδεδεμένων διαφορικών προβλημάτων:

$$\begin{gathered} D_i u = f_i \; in \; \Omega_i, \\ G_{i,j} u = 0 \; on \; \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j \backslash \partial\Omega \; \forall j \neq i, \quad B_i u = c_i \; on \; \partial\Omega_i \cap \partial\Omega \end{gathered} \tag{2}$$

όπου $i = 1, \dots, p$. Αυτά τα διαφορικά προβλήματα συνδέονται μέσω των συνθηκών των διεπαφών $G_{i,j} u = 0$ και περιλαμβάνουν τους περιορισμούς D_i και B_i των ολικών διαφορικού και συνθήκης τελεστών D και B, αντίστοιχα σε κάθε υποπεδίο, με κάποιους από αυτούς γραμμικούς και άλλους μη γραμμικούς. Οι συναρτήσεις f_i και c_i είναι ανάλογοι περιορισμοί των συναρτήσεων f και c. Ο τοπικός τελεστής διεπαφής $G_{i,j}$ σχετίζεται με τη μέθοδο χαλάρωσης στη διεπαφή και διαφορετικές επιλογές για τα $G_{i,j}$ οδηγούν σε διαφορετικά σχήματα χαλάρωσης. Στην παρούσα μελέτη θα αναφερθούμε σε διάφορες μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή που έχουν τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

- Αποσυνθέτουν αρχικά το πρόβλημα (1) στο διαφορικό επίπεδο και στη συνέχεια διακριτοποιούν τα προκύπτοντα διαφορικά υποπροβλήματα (2).
- Έχουν την ευελιξία να χρησιμοποιούν το καταλληλότερο σχήμα διακριτοποίησης για κάθε υποπρόβλημα.
- Δεν επικαλύπτουν τα υποπεδία Ω_i.
- Με χρήση καλών παραμέτρων χαλάρωσης στο $G_{i,j}$ είναι αρκετά γρήγορες, ώστε να μη χρειάζεται preconditioning.
- Απλοποιούν τη γεωμετρία και τη φυσική του υπολογισμού λαμβάνοντας υπόψη τα υποπροβλήματα (2) και όχι το συνολικό διαφορικό πρόβλημα (1).
- Μπορούν να χρησιμοποιούν τμήματα λογισμικού ξαναχρησιμοποιώντας τμήματα λογισμικού επιλυτών για την επίλυση των μεμονωμένων υποπροβλημάτων (2).
- Είναι γενικοί και ισχυροί.

Υπάρχουν διάφορα ερωτήματα με πρόκληση που αφορούν πρακτικές εφαρμογές τέτοιων μεθόδων, όπως το να βρίσκεις τον καταλληλότερο χαλαρωτή για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα, να καθορίζεις το πεδίο εφαρμογής καθενός, να εξηγείς την αλληλεπίδραση ανάμεσα στη μαθηματική επανάληψη και τη μέθοδο αριθμητικής επίλυσης, να επιλέγεις καλές ή βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους χαλάρωσης, κλπ. Αξίζει να σημειωθεί ότι εφόσον όλες οι μέθοδοι αποσυνθέτουν και χαλαρώνουν τις τιμές των διεπαφών στο συνεχές επίπεδο, η ανάλυση σύγκλισης αυτών των μεθόδων χρειάζεται να γίνει επίπεδο των ΜΔΕ (συνεχές) και άρα είναι ένα πρόβλημα μαθηματικής ανάλυσης και όχι αριθμητικής. Μια λεπτομερής περιγραφή και σύγκριση τω δύο μεθοδολογιών χαλάρωσης δίνεται στην αναφορά [16].

2.4 Εφαρμογή ενός υβριδικού παράλληλου Monte Carlo επιλυτή ΜΔΕ σε ορθογώνια πολλαπλά πεδία

2.4.1. Εισαγωγή

Η μέθοδος Monte Carlo είναι γνωστή εδώ και πολλά χρόνια, αλλά μόνο μετά την εμφάνιση των πρώτων ηλεκτρονικών υπολογιστών, η μέθοδος έχει αποκτήσει ένα αυξανόμενο ενδιαφέρον ως ένα εργαλείο για την επίλυση σημαντικών φυσικών προβλημάτων. Ο αλγόριθμος Monte Carlo παράγει ένα τυχαίο περίπατο,

χρησιμοποιώντας μια προτεινόμενη πυκνότητα και περιλαμβάνει μια μέθοδο για την απόρριψη/αποδοχή των προτεινόμενων κινήσεων. Σήμερα χρησιμοποιείται σχεδόν σε κάθε πτυχή της επιστημονικής έρευνας. Οι Monte Carlo μέθοδοι προσέλκυαν πάντα τους ανθρώπους που εργάζονται στον τομέα της αριθμητικής επίλυσης ΜΔΕ. Αυτή η έλξη έχει εξελιχθεί με το πέρασμα των χρόνων σε συνδυασμό με τις ραγδαίες αλλαγές στην τεχνολογία, όπως ο παράλληλος υπολογισμός, τα clusters υπολογιστών κ.λπ. [1] [2] [3].

2.4.2. Ανάλυση βασικού αλγορίθμου

2.4.2.1. Περιγραφή βασικού αλγορίθμου

Το αρχικό βήμα προς την κατεύθυνση της αξιοποίησης της απόδοσης ενός cluster πολλαπλών πυρήνων ήταν η εκτέλεση ενός profiling της ακολουθιακής υλοποίησης για τον εντοπισμό hotspots στον κώδικα που θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε μείωση του χρόνου εκτέλεσης, αν γίνει παράλληλη υλοποίηση αποτελεσματικά. Η ανάλυση απόδοσης βασίστηκε στην υλοποίηση των αλγορίθμων που προτείνονται στο Vavalis et al [4]. Η εν λόγω υλοποίηση είναι σε θέση να λύσει την εξίσωση Poisson με Dirichlet συνοριακές συνθήκες για 2D και 3D υπέρ-ορθογώνια πεδία, αλλά μπορεί εύκολα να επεκταθεί για να χρησιμοποιεί άλλες μεθόδους και πεδία. Ο αλγόριθμος είναι ένας υβριδικός αλγόριθμος με την έννοια ότι τόσο ντετερμινιστικές όσο και μη ντετερμινιστικές μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση των πεδίων. Αρχικά, εφαρμόζεται μια πιθανοτική αποσύνθεση πεδίου για τον υπολογισμό εκτιμήσεων των τοπικών λύσεων κατά μήκος των ορίων του υποπεδίου με τη μέθοδο Monte Carlo [5] και στη συνέχεια εφαρμόζεται μια παρεμβολή στις εκτιμήσεις των τοπικών λύσεων [6]. Ειδικότερα, για διδιάστατα πεδία χρησιμοποιείται η Burkardt's splines βιβλιοθήκη [7], ενώ η Multilevel B-spline (MBA) [8] βιβλιοθήκη χρησιμοποιείται ώστε τα τρισδιάστατα πεδία να σχηματίσουν τα όρια των νέων υποπεδίων. Τέλος, καθώς τα όρια των υποπεδίων είναι γνωστά ένας ντετερμινιστικός Laplace επιλυτής που χρησιμοποιεί τη Deal.II [9] χρησιμοποιείται για να βρει τη λύση του προβλήματος για κάθε υποπεδίο. Η βασική υλοποίηση μπορεί να περιγραφεί με τον ακόλουθο ψευδοκώδικα.

```
    Προσδιόρισε τις συντεταγμένες των κόμβων όλων των
υποπεδίων
    Για κάθε κόμβο
    Δημιούργησε μια δουλειά
    Ανάθεσε τη δουλειά σε ένα νήμα
        Εκτέλεσε Monte Carlo για να υπολογίσεις τις τιμές
    των κόμβων
    Χρησιμοποίησε μια (2|3) διαστάσεων συνάρτηση παρεμβολής
για να βρεις νέα όρια
    Για κάθε υποπεδίο
    Δημιούργησε μια δουλειά
    Ανάθεσε τη δουλειά σε ένα νήμα
    Λύσε με Laplace επιλυτή
    Πάραξε τα αποτελέσματα
```

Μια ενδιαφέρουσα λεπτομέρεια υλοποίησης είναι ότι παραλληλοποίηση διαμοιραζόμενης μνήμης ήδη υποστηρίζεται χρησιμοποιώντας την Pthreads βιβλιοθήκη.

2.4.2.2. Profiling βασικού κώδικα

Πριν την παραλληλοποίηση κώδικα σε μια αρχιτεκτονική κατανεμημένης μνήμης, ένα βήμα profiling είναι σημαντικό προκειμένου να γίνουν αντιληπτά τα σημεία όπου ο κώδικας σπαταλά χρόνο εκτέλεσης και να καθοριστεί η ακολουθία εκτέλεσης. Με αυτόν τον τρόπο, ο κώδικας μπορεί να υποδιαιρεθεί σε πυρήνες που μπορούν να αναλυθούν για να προσδιορισθεί αν είναι δυνατή η αξιοποίηση των υπολογιστικών πόρων παράλληλα και εάν η παραλληλοποίηση κάποιου πυρήνα θα έχει σημαντική επίπτωση στη συνολική εκτέλεση του προγράμματος. Μια εκτενής ανάλυση απόδοσης έχει πραγματοποιηθεί, χρησιμοποιώντας μια σειρά από διαφορετικές διαμορφώσεις παραμέτρων για το χρησιμοποιηθέν πρόβλημα (Πίνακας 1) και έχουν εντοπιστεί τρεις πυρήνες που θα μπορούσαν ενδεχομένως να βελτιώσουν τη συνολική απόδοση αν υπήρχε μια κατανεμημένη υλοποίηση. Οι τρεις πυρήνες είναι ο Monte Carlo αλγόριθμος, ο αλγόριθμος Παρεμβολής και ο Laplace Επιλυτής. Καθώς για τα περισσότερα προβλήματα εισόδου ο Monte Carlo αλγόριθμος έπαιρνε από 50% έως 94% του χρόνου εκτέλεσης, οι προσπάθειές μας επικεντρώθηκαν σε μια αποτελεσματική παραλληλοποίηση του αλγορίθμου Monte Carlo με χρήση MPI.

Ο Πίνακας 1 παρουσιάζει τα κύρια χαρακτηριστικά των προβλημάτων εισόδου. Το *dim* αντιπροσωπεύει αν το πρόβλημα είναι διδιάστατο ή τρισδιάστατο, το *dlen* το μήκος του πεδίου κατά μήκος κάθε διάστασης, το *subd* τον αριθμό των υποπεδίων κατά μήκος κάθε διάστασης, το *dect* τον τύπο αποσύνθεσης για κάθε διάσταση με *u* να αντιπροσωπεύει την ομοιόμορφη και *n* την ανομοιόμορφη, το *decc* τις συντεταγμένες των διεπαφών που αντιστοιχούν σε κάθε διάσταση κατά μήκος της οποίας το πεδίο αποσυντίθεται ανομοιόμορφα, το *nppp* τον αριθμό των κόμβων σε μια διεπαφή κατά μήκος μιας διάστασης. Για διδιάστατα προβλήματα παίρνει 2 ορίσματα που αντιστοιχούν στις γραμμές αποσύνθεσης κατά μήκος της διάστασης Y και X αντίστοιχα, ενώ για τρισδιάστατα παίρνει 6 ορίσματα, με κάθε ζευγάρι να αντιστοιχεί στα επίπεδα αποσύνθεσης YZ, XZ και XY αντίστοιχα. Τέλος, το *btol* αντιπροσωπεύει την ανοχή στο όριο.

Πρόβλημα	Dim	Dlen	Subd	Dect	Decc	nppp	Btol
1	2D	1. 1.	2 4	n u	.3	12 12	1e-15
2	2D	1. 1.	2 4	n n	.3 .25 .5 .7	12 12	1e-15
3	2D	1. 1.	2 4	n n	.3 .25 .5 .7	12 12	1e-15
4	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	u u u	5 5 5 5	12 12	1e-15
5	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	u n u	.5 .55 5 5 5 5	5 5 5 5 7 7	1e-15
6	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	n n n	.5 .4 .5 .55 1.2 5 5 5 5	5 5 5 5 7 7	1e-15
7	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	n n n	.5 .4 .5 .55 1.2 5 5 5 5	5 5 5 5 7 7	1e-15

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικά προβλημάτων εισόδου

Ο Πίνακας 2 παρουσιάζει το ποσοστό του ακολουθιακού χρόνου εκτέλεσης για διάφορα μεγέθη περιπάτων των προβλημάτων εισόδου για τους προαναφερθέντες πυρήνες, με το MC να σημαίνει Monte Carlo, το I παρεμβολή και το LS επιλυτής Laplace.

Περίπατοι	5K			20K			80K		
Πρόβλημα	C		S	C		S	C		S
1									

	0%		%	9%		%	5%		%
2	0%		0%	6%		%	0%		%
3	4%		%	8%		%	2%		%
4	0%	3%	%	5%	1%	%	8%	%	%
5	0%	0%	0%	3%	%	%	0%	%	%
6	8%	2%	0%	4%	0%	%	4%	%	%
7	4%	0%	%	1%	1%	%	0%	%	%

Πίνακας 2: Ανάλυση απόδοσης

2.4.2.4. Υβριδική προσέγγιση παραλληλοποίησης

Καθώς η βασική υλοποίηση [4] ήδη υποστηρίζει παραλληλοποίηση διαμοιραζόμενης μνήμης του Monte Carlo και του Laplace επιλυτή με χρήση Pthreads, εστιάσαμε στην άμεση υλοποίηση μιας υβριδικής παράλληλης υλοποίησης με χρήση OpenMPI [6] για επικοινωνία μεταξύ διεργασιών. Βασισμένοι στα πειραματικά αποτελέσματα της ανάλυσης απόδοσης, συμπεράναμε ότι:

1. ένα απλό master/worker σχήμα ήταν αρκετό για να κατανείμει τον υπολογιστικό φόρτο του Monte Carlo πυρήνα ανάμεσα στις διεργασίες. Αυτό οφείλεται στο ότι η δουλειά κάθε Monte Carlo νήματος καθορίζεται κυρίως από τον αριθμό των περιπάτων, οπότε μια δίκαιη κατανομή κόμβων μεταξύ των worker διεργασιών και άρα και η τοπική κατανομή κόμβων μεταξύ των νημάτων δεν θα δημιουργήσει κάποια ιδιαίτερη ανισορροπία φόρτου.
2. η master διεργασία μπορούσε αποδοτικά να υλοποιήσει τους πυρήνες της παρεμβολής και του Laplace επιλυτή για κάθε υποπεδίο τοπικά με χρήση threads, αφού είχε πρώτα λάβει την απαιτούμενη εκτίμηση των σχετικών κόμβων από τις άλλες διεργασίες.

Η λογική του βασικού κώδικα [4] μένει σχετικά απαράλλακτη. Προστέθηκε μόνο ένα επίπεδο που κατανείμει τον υπολογιστικό φόρτο και συλλέγει τα αποτελέσματα εκτίμησης από κάθε worker.

2.5 Υλοποίηση Μεθόδων IR στη FEniCS

2.5.1. Εισαγωγή

Η επίλυση μεγάλων και σύνθετων Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ) είναι ένα πρόβλημα που αντιμετωπίζεται κυρίως με τεχνικές διακριτοποίησης πεδίου [2, 3]. Αυτή η προσέγγιση περιλαμβάνει την αποσύνθεση στο επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας μετά την διακριτοποίηση του πεδίου και της εξίσωσης με την επιθυμητή μέθοδο, δηλαδή: Πεπερασμένων Διαφορών (ΠΔ) ή πεπερασμένων στοιχείων (ΠΣ). Το κύριο χαρακτηριστικό αυτών των μεθόδων είναι η μη ευελιξία για την επιλογή διαφορετικών μεθόδων για κάθε υποπεδίο του αρχικού προβλήματος. Η μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή είναι μια ενδιαφέρουσα εναλλακτική λύση [17], 18]. Εδώ, το πεδίο των ΜΔΕ αποσυντίθεται σε υποπεδία, για λόγους που προέρχονται από την

φυσική ή για λόγους παραλληλισμού, και την ίδια στιγμή αρχικές μαντεψιές καθορίζονται στις διεπαφές μεταξύ των υποπεδίων. Τα υποπροβλήματα επιλύονται και νέες τιμές στις διεπαφές υπολογίζονται με συγκεκριμένες μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή (επιβάλλοντας τις σωστές συνθήκες για το πρόβλημα) επαναληπτικά έως ότου επιτευχθεί η σύγκλιση.

Περιβάλλοντα επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών που υλοποιούν τη μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή θα πρέπει να είναι ικανά να φιλοξενούν και να ενσωματώνουν μια ποικιλία υφιστάμενων επιλυτών ΜΔΕ και μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή. Αυτοί οι επιλυτές πρέπει να παρέχουν μια ελάχιστη λειτουργικότητα συμπεριλαμβανομένων των εξής: ορισμό πεδίου και ΜΔΕ, δημιουργία πλέγματος, σχήμα διακριτοποίησης, εκτίμηση της λύσης και της παραγώγου σε οποιοδήποτε σημείο του πεδίου συμπεριλαμβανομένων των ορίων / διεπαφών. Οι υφιστάμενες υλοποιήσεις, που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 2, έχουν διάφορα μειονεκτήματα, μεταξύ των οποίων το ότι εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από πλατφόρμες πρακτόρων και την βιβλιοθήκη PELLPACK, αποκαλύπτοντας έτσι την ανάγκη μιας νέας υλοποίησης απαλλαγμένης από αυτούς τους περιορισμούς.

Στην παρούσα μελέτη υλοποιούμε μια από τις μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή, που παρουσιάστηκαν 2η Ετήσια Έκθεση Προόδου, τη geometric (GEO) contraction based στη FEniCS. Η FEniCS [19] είναι μια συλλογή ελεύθερου λογισμικού για αυτοματοποιημένη, αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Οι λόγοι για την επιλογή της FEniCS είναι, μεταξύ άλλων, ότι είναι αξιόπιστη, αποδοτική, ελεύθερη και υποσχόμενη να υποστηρίζεται και στο μέλλον. Μια παράλληλη υλοποίηση της GEO στη FEniCS με τη βοήθεια του RabbiMQ (προσανατολισμένο σε μηνύματα middleware) [20] παρουσιάζεται, επίσης. Στη συνέχεια του κεφαλαίου παρουσιάζονται σύντομα η FEniCS, το RabbiMQ και ζητήματα τόσο της σειριακής, όσο και της παράλληλης υλοποίησης.

2.5.2. Υλοποίηση στη FEniCS

Σκοπεύοντας στην ενσωμάτωση της μεθόδου GEO, μαζί με άλλες μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή, σε ένα ολοκληρωμένο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων που να αφορά προβλήματα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών την υλοποιήσαμε στη FEniCS. Η FEniCS παρέχει κλάσεις και μεθόδους με τις οποίες είναι δυνατός ο καθορισμός των ιδιοτήτων των υποπεδίων του προβλήματος (γεωμετρία πεδίου, τελεστής ΜΔΕ και οριακές συνθήκες ή/και συνθήκες διεπαφών). Οι μέθοδοί της μπορούν επίσης να δημιουργήσουν ή/και να βελτιώσουν πλέγματα (τριγωνικά στοιχεία) για κάθε υποπεδίο, να επιλύσουν τα τοπικά προβλήματα ΜΔΕ και να απεικονίσουν τα υπολογισμένα αποτελέσματα για ολόκληρο το πεδίο και για τις διεπαφές. Ο προεπιλεγμένος επιλυτής στα προγράμματα της FEniCS είναι η αραιή LU αποσύνθεση, καθώς είναι ισχυρή για κάποιες χιλιάδες αγνώστους στο σύστημα εξισώσεων. Παρόλα αυτά, η αραιή LU αποσύνθεση γίνεται αργή και πολύ απαιτητική σε μνήμη για μεγάλα προβλήματα. Για αυτό το λόγο η FEniCS παρέχει εναλλακτικά και επαναληπτικές μεθόδους, όπως οι preconditioned Krylov επιλυτές, οι οποίοι είναι γρηγορότεροι και απαιτούν σημαντικά λιγότερη μνήμη. Μια πλήρης λίστα των διαθέσιμων Krylov επιλυτών και preconditioners μπορεί να βρεθεί στην τεκμηρίωση της FEniCS [19]. Στην πραγματικότητα, οι υλοποιήσεις των επιλυτών που τίθενται σε δράση εξαρτώνται από την επιλογή του πακέτου γραμμικής άλγεβρας. Η FEniCS υποστηρίζει διάφορα πακέτα γραμμικής άλγεβρας, που αποκαλούνται backends στην ορολογία της FEniCS. Το PETSc είναι το προεπιλεγμένο backend και εναλλακτικά backends που υποστηρίζονται είναι τα uBLAS, Epetra (Trilinos) και MTL4.

Για την καλύτερη κατανόηση του τρόπου με τον οποίο ένα πρόβλημα επιλύεται στη FEniCS πειραματιστήκαμε με το ακόλουθο πρόβλημα-μοντέλο, που είναι το Poisson πρόβλημα:

$$-\nabla^2 u(x) = f(x), \quad x \; in \; \Omega,$$
$$u(x) = u_0(x), \quad x \; on \; \partial\Omega.$$

Εδώ, η $u(x)$είναι η άγνωστη συνάρτηση, η $f(x)$ είναι μια ορισμένη συνάρτηση, το ∇^2 είναι ο τελεστής Laplace, το Ω είναι το χωρικό πεδίο και το $\partial\Omega$ είναι το όριο του Ω. Μια ΜΔΕ σαν αυτή, μαζί με ένα πλήρες σύνολο από οριακές συνθήκες αποτελούν ένα πρόβλημα οριακών τιμών, που πρέπει να οριστεί πλήρως πριν την επίλυσή του στη FEniCS.

2.5.3. RabbitMQ

Για την παράλληλη υλοποίηση στην πλατφόρμα FEniCS χρησιμοποιήθηκε το RabbitMQ [20]. Το RabbitMQ είναι ένας ελαφρύς, αξιόπιστος, επεκτάσιμος και φορητός μεσολαβητής μηνυμάτων. Δίνει στις εφαρμογές μια κοινή πλατφόρμα για αποστολή και λήψη μηνυμάτων. Το RabbitMQ τρέχει σε όλα τα κύρια λειτουργικά συστήματα και είναι εύκολο στη χρήση. Υποστηρίζει έναν τεράστιο αριθμό από πλατφόρμες ανάπτυξης, μεταξύ των οποίων και την Python, που είναι η πλατφόρμα ανάπτυξης της FEniCS. Το RabbitMQ βασίζεται στο Advanced Message Queuing Protocol (AMQP). Το AMQP είναι ένα πρωτόκολλο μηνυμάτων που ασχολείται με εκδότες και καταναλωτές. Οι εκδότες παράγουν τα μηνύματα, οι καταναλωτές τα λαμβάνουν και τα επεξεργάζονται.

Στην παρούσα μελέτη δημιουργήθηκε ένα σύστημα κλήσης απομακρυσμένης διαδικασίας (Remote Procedure Call - RPC), βασισμένο στο RabbitMQ καθότι υπάρχει μεγάλη ανάγκη για επικοινωνία κατά τη διάρκεια της παράλληλης επίλυσης των προβλημάτων ΜΔΕ. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε τη διαδικασία δημιουργίας ενός RPC συστήματος (που επιστρέφει Fibonacci αριθμούς): ένας πελάτης και ένας server χρησιμοποιώντας το RabbitMQ.

2.5.4. Σειριακή Υλοποίηση

Η geometric (GEO) contraction based μέθοδος υλοποιείται σαν ένα FEniCS πρόγραμμα γραμμένο στην προγραμματιστική γλώσσα Python. Η βιβλιοθήκη DOLFIN χρησιμοποιείται για την εισαγωγή κλάσεων χρήσιμων για τη δημιουργία των υποπεδίων του προβλήματος και τη δημιουργία πλεγμάτων (τριγωνικά στοιχεία) σε αυτά τα υποπεδία. Στη συνέχεια δηλώνουμε και εφαρμόζουμε τις οριακές συνθήκες, καθώς επίσης και τις αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές των υποπεδίων. Το πρόβλημα ΜΔΕ πρέπει να εκφραστεί σαν ένα παραμετρικό (variational) πρόβλημα και στη συνέχεια να οριστεί στο πρόγραμμα. Μετά τον υπολογισμό της λύσης, πραγματοποιείται και ο υπολογισμός της παραγώγου.

Η δημιουργία κατάλληλων συναρτήσεων για την λήψη των τιμών της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών (όρια των υποπροβλημάτων), ο υπολογισμός των νέων χαλαρωμένων τιμών και το πέρασμά τους πίσω στα υποπροβλήματα σαν ανανεωμένες τιμές για τις διεπαφές ήταν οι κυριότερες προκλήσεις της υλοποίησης της GEO.

2.5.5. Παράλληλη Υλοποίηση

Δεδομένου ότι η μέθοδος GEO είναι εγγενώς παραλληλίσιμη, στην παράλληλη υλοποίησή της κάθε κόμβος επιλύει ένα υποπεδίο. Οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από κάθε κόμβο (που επιλύει ένα υποπεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υποπεδία) στέλνονται σαν ένα RabbiMQ μήνυμα, έτσι ώστε η νέα επανάληψη να ξεκινήσει και στον άλλο κόμβο επίσης. Αυτό το σχήμα, που δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού των μηνυμάτων που ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας.

Άρα, το μεσαίο πεδίο το επιλύει ένας client και τα άλλα δύο ένας server το καθένα. Αυτοί οι servers χειρίζονται και τις διεπαφές.

2.6 Ασύγχρονη Μέθοδος Χαλάρωσης Διεπαφών

2.6.1. Εισαγωγή

Η επίλυση των σύνθετων μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDEs) είναι ένα αναπόφευκτο βήμα στις πολυάριθμες επιστημονικές εφαρμογές. Εντούτοις, αυτό είναι μια διαδικασία υπολογιστικά απαιτητική και με μεγάλες απαιτήσεις μνήμης για τις μεγάλης κλίμακας διαφορικές εξισώσεις. Αυτό ισχύει ιδιαίτερα για τα προβλήματα πολλαπλών-περιοχών και πολλαπλής-φυσικής όπου διαφορετικοί τελεστές PDE εφαρμόζονται στα διαφορετικά subdomains. Οι τεχνικές αποσύνθεσης περιοχών [1], [2] χρησιμοποιήθηκαν πρώτιστα για να αντιμετωπίσουν τέτοια προβλήματα. Περιλαμβάνουν την αποσύνθεση στο γραμμικό επίπεδο άλγεβρας με διακριτοποίηση της περιοχής και της εξίσωσης με την επιθυμητή μέθοδο. Αν και, το κύριο μειονέκτημά τους είναι η μη ευελιξία στη χρήση της διαφορετικής μεθόδου ανά subdomain του αρχικού προβλήματος. Η μεθοδολογία χαλάρωσης διεπαφών είναι μια ενδιαφέρουσα εναλλακτική λύση [3]– [5].

Το κύριο πλεονέκτημα των μεθόδων IR είναι ότι μεταχειρίζονται ένα πρόβλημα πολλαπλών-περιοχών /πολλαπλής φυσικής ως αόριστα συνδεμένο σύστημα των υπο-προβλημάτων που αποτελούνται από τα πολύ απλούστερα προβλήματα PDE και σχετικά με τη γεωμετρία και το διαφορικό τελεστή. Πιο συγκεκριμένα, στις μεθόδους IR η περιοχή PDE αποσυντίθεται στα subdomains, που παράγονται από την ελλοχεύουσα φυσική ή από τις υψηλές υπολογιστικές ανάγκες.

Σε αυτή τη δράση έγινε μια ασύγχρονη παράλληλη εφαρμογή της μεθόδου GEO/IR [6]. Η προτεινόμενη μεθοδολογία κατορθώνει να υπερνικήσει την παραδοσιακή δυσχέρεια των παράλληλων μεθόδων IR και να εκμεταλλευτεί τον ελλοχεύοντα έμφυτο παραλληλισμό της λύσης των subdomains, που καθιστούν τη μέθοδο εξελικτική στη μεγάλη κατανεμημένη παράλληλη εγκατάσταση. Μια προκαταρκτική πειραματική αξιολόγηση του ασύγχρονου GEO καταδεικνύει την εξελιξιμότητα και την αποτελεσματικότητά της για τη λύση των αρκετά μεγάλων προβλημάτων πολλαπλών-περιοχών και πολλαπλής-φυσικής.

2.6.2. Σειριακός αλγόριθμος

Το πρόβλημα PDE διαιρείται στα υπο-προβλήματα, κάθε ένα από τα οποία διακριτοποιείται με την κατάλληλη μέθοδο. Οι οριακές συνθήκες πρέπει να

διευκρινιστούν και να εφαρμοστούν σε κάθε υπο-πρόβλημα, καθώς επίσης και οι αρχικές συνθήκες στις διεπαφές μεταξύ των υποπροβλημάτων. Κατόπιν παρουσιάζονται η λύση και η κλίση κάθε υπο-προβλήματος. Αφότου εκτελείται το βήμα λύσης, πρέπει να πάρουμε τις τιμές της λύσης και της κλίσης στα σημεία διεπαφών και να υπολογίσουμε τις νέες χαλαρωμένες τιμές. Με τη μέθοδο GEO / IR [6] οι νέες χαλαρωμένες τιμές στα σημεία διεπαφών λαμβάνονται με την προσθήκη στα παλαιά ενός γεωμετρικά σταθμισμένου μέσου όρου των κανονικών παραγώγων ορίου των παρακείμενων subdomains.

2.6.3. Σύγχρονος παράλληλος αλγόριθμος

Η GEO έχει μια βαθιά στατική παράλληλη εφαρμογή, όπου κάθε κόμβος αντιπροσωπεύει έναν υπολογιστικό πυρήνα που λύνει ένα subdomain. Οι υπολογισμένες λύσεις PDE και οι κλίσεις στα σημεία διεπαφών από κάθε κόμβο στέλνονται ως μήνυμα στον κόμβο που χειρίζεται το παρακείμενο subdomain. Όταν κάθε κόμβος λαμβάνει όλες τις παρακείμενες πληροφορίες σημείων διεπαφών, υπολογίζει τις νέες χαλαρωμένες τιμές σημείων διεπαφών, που εξυπηρετούν τόσο τις νέες εκτιμήσεις για την επόμενη επανάληψη των παρακείμενων subdomains και τις στέλνει πίσω σαν μηνύματα. Όταν οι νέες τιμές διεπαφών σταλούν σε όλα τα subdomains, η επόμενη επανάληψη μπορεί να αρχίσει σε όλους τους κόμβους.

2.6.4. Ασύγχρονος παράλληλος αλγόριθμος

Η κύρια δυσχέρεια του παράλληλου αλγορίθμου GEO προκύπτει όταν τα υπο-προβλήματα έχουν πολλούς γείτονες, τα οποία είναι άνισου μεγέθους, και έτσι άνισου υπολογιστικού φόρτου εργασίας. Κατά συνέπεια, κάθε υπο-πρόβλημα πρέπει να περιμένει έως ότου τελειώνουν οι όλοι γείτονές του το βήμα λύσης τους και οι νέες χαλαρωμένες τιμές έχουν υπολογιστεί για όλες τις διεπαφές.

Στην ασύγχρονη προσέγγιση παραλληλισμού, το βήμα συγχρονισμού είναι χρονικά χαλαρωμένο και κάθε subdomain υπολογίζεται επαναληπτικά βασισμένο στις πρόσφατες διαθέσιμες τιμές διεπαφών που παρέχονται από τις γειτονικές υπο-περιοχές. Το παραπάνω σχήμα δημιουργεί μια σειρά αναμονής μηνυμάτων για κάθε subdomain, με τη σειρά αναμονής που γεμίζουν με τα μηνύματα για τις νέες τιμές διεπαφών από τα γειτονικά subdomains. Στην περίπτωση που δεν υπάρχει κανένα νέο μήνυμα, ο επιλυτής του subdomain περιμένει. Εάν η σειρά αναμονής δεν είναι κενή, όλα τα μηνύματα καταναλώνονται σε μια διάταξη LIFO για κάθε διεπαφή και τα παλαιότερα μηνύματα απορρίπτονται. Οι νέες τιμές για κάθε διεπαφή υπολογίζονται τοπικά και αρχίζει μια νέα επανάληψη των επιλυτών PDE για το αντίστοιχο subdomain. Στο τέλος κάθε τοπικής επανάληψης, οι νέες τοπικές υπολογισμένες τιμές σε όλες τις διεπαφές στέλνονται ασύγχρονα στους αντίστοιχους γείτονες. Η διαδικασία τελειώνει όταν για όλες τις διεπαφές αποτυγχάνουν να βρουν όλα τα subdomains τη σημαντική διαφορά στις νέες τιμές που υπολογίζονται.

2.7 Παραλληλοποίηση Alopex

Στην παρούσα δράση παραλληλοποιήθηκε από την ΚΕΟ 3 η μέθοδος Alopex στην εφαρμογή της για το πρόβλημα της υφαλμύρισης υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης στα πηγάδια στο Βαθύ της Καλύμνου που έχει υλοποιηθεί από την ΚΕΟ 1. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα η Alopex υπολογίζει επαναληπτικά νέες

τιμές αντλήσεων των πηγαδιών σε μια προσπάθεια να βρεθεί εκείνος ο συνδυασμός αντλήσεων που δίνει το μέγιστο κέρδος χωρίς ταυτόχρονα να υφαλμυριστεί κάποιο πηγάδι.

Στην παράλληλη υλοποίηση της ΚΕΟ3 ο υπολογισμός νέων τιμών αντλήσεων των πηγαδιών διανέμεται σε μεταβλητό αριθμό εικονικών μηχανών που μπορεί να ορίζει ο χρήστης ή το σύστημα ανάλογα με τους διαθέσιμους πόρους. Αφού υπολογιστούν διάφοροι συνδυασμοί αντλήσεων επιλέγεται ένας συνδυασμός με έναν από τους παρακάτω τρόπους είτε βάσει επιλογής του χρήστη είτε τυχαία:

- η υψηλότερη συνολική άντληση,
- τυχαία επιλογή όπου ο κάθε συνδυασμός είναι ισοπίθανος
- τυχαία επιλογή όπου ο κάθε συνδυασμός έχει πιθανότητα επιλογής ανάλογη της συνολικής άντλησης

Επίσης δίνεται η δυνατότητα βάσει επιλογής του χρήστη οι τιμές των αντλήσεων στις πρώτες επαναλήψεις να μεταβάλλονται εντονότερα από ότι στις επόμενες.

Τα αποτελέσματα της εφαρμογής της παράλληλης υλοποίησης της Alopex στο πρόβλημα της υφαλμύρισης υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης στα πηγάδια στο Βαθύ της Καλύμνου είναι ενθαρρυντικά καθώς παρατηρείται σύγκλιση σε μικρότερο αριθμό επαναλήψεων.

Συνδυασμός Alopex με Interface Relaxation μεθόδους

Το πρόβλημα των πηγαδιών στο Βαθύ της Καλύμνου είναι ένα πρόβλημα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών, οπότε στην παρούσα δράση εξετάζεται η δυνατότητα επίλυσής του με Interface Relaxation μεθόδους σε κάθε Alopex επανάληψη. Αρχικά εφαρμόστηκε η GEO IR μέθοδος, η οποία δεν έδωσε καλά αποτελέσματα λόγω της φύσης του προβλήματος. Οπότε, στη συνέχεια εφαρμόστηκε η ROB IR μέθοδος η οποία δίνει ενθαρρυντικά αποτελέσματα που χρήζουν όμως περαιτέρω μελέτης.

3. Αποτελέσματα Παράλληλης Υλοποίησης Αλγορίθμων

Σε αυτό το κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της παράλληλης υλοποίησης των αλγορίθμων που παρουσιάστηκαν στο κεφάλαιο 2. Αρχικά ο έλεγχος έγινε με απλά παραδείγματα μοντέλων πολλαπλών πεδίων, ακολούθησαν πιο σύνθετα προβλήματα, σε συνεργασία με μέλη της ΚΕΟ 2. Τέλος, σε συνεργασία με την ΚΕΟ 1, η παραπάνω μεθοδολογία εφαρμόστηκε στο πραγματικό πρόβλημα υφαλμύρισης των πηγαδιών στο Βαθύ της Καλύμνου.

3.1. Μέθοδοι χαλάρωσης στη Διεπαφή

Μία σύντομη μελέτη αξιολόγησης απόδοσης των μεθόδων μπορεί να βρεθεί στο [21] (του κεφ. 2.3) όπου παρουσιάζονται και συζητούνται αριθμητικά δεδομένα για μονοδιάστατα προβλήματα. Τα προβλήματα αυτά μπορεί να θεωρηθούν πολύ απλά για να έχουν πρακτική αξία, αλλά ο πειραματισμός μαζί τους ανέδειξε διάφορες πλευρές της φύσης των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή. Τα ποιοτικά τους

χαρακτηριστικά φαίνονται στον πίνακα 1. Η ταχύτητα σύγκλισης, όπως φαίνεται μπορεί να είναι χαμηλή, μέση ή υψηλή. Οι επαναλήψεις μπορούν να προσεγγίζουν την πραγματική λύση μονότονα ή όχι και μπορεί να υπάρχουν μία, δύο ή καμία παράμετροι χαλάρωσης για να επιταχύνουν τη σύγκλιση. Κάποιες μέθοδοι είναι ενός βήματος, άλλες όχι και κάποιες χρησιμοποιούν ιστορία (η καινούργια τιμή στη διεπαφή ισούται με την παλιά συν έναν όρο διόρθωσης), ενώ άλλες όχι.

	Ταχύτητα	Μονοτ/κότητα Σύγκλισης	Αριθμός Παραμέτρων	Διαθέσιμη Θεωρία	Ιστορία	Ενός Βήματος
VE	Μέση	Όχι	2	**Λίγη**	Όχι	Όχι
EO	Μέση	**Ναι**	2	**Λίγη**	**Ναι**	**Ναι**
EW	Μέση	Όχι	**Καμία**	Όχι	**Ναι**	**Ναι**
OB	Χαμηλή	Όχι	1	**Λίγη**	Όχι	**Ναι**
CO	Μέση	Όχι	1	**Λίγη**	**Ναι**	Όχι
HO	Μέση	**Ναι**	**Καμία**	**Λίγη**	**Ναι**	**Ναι**
PO	**Υψηλή**	**Ναι**	1	Όχι	**Ναι**	Όχι

Πίνακας 3: Ιδιότητες των επτά μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή

Τα βασικά συμπεράσματα που προκύπτουν από αυτή τη συγκριτική ανάλυση είναι ότι υπάρχουν αρκετές μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή που δείχνουν ότι έχουν τις δυνατότητες να δουλέψουν αποδοτικά και ότι μένουν ακόμα πολλά να μάθουμε για τη συμπεριφορά τους και για το πώς να διαλέγουμε ανάμεσά τους την κατάλληλη, αλλά και το πώς να διαλέγουμε τις παραμέτρους τους.

Στην παρούσα μελέτη η μέθοδος που θα υλοποιήσουμε είναι η GEO γιατί είναι μία από αυτές που έχουν πολύ καλά χαρακτηριστικά, όπως μονοτονικότητα στη σύγκλιση, χρήση ιστορίας (η καινούργια τιμή στη διεπαφή ισούται με την παλιά συν έναν όρο διόρθωσης) και το ότι είναι ενός βήματος. Επίσης γιατί για τη GEO υπάρχει μια πρόσφατη υλοποίηση [18] (κεφ. 2.3) με την οποία μπορούμε να συγκρίνουμε την προτεινόμενη υλοποίηση. Η υλοποίηση βέβαια και των υπόλοιπων έξι μεθόδων στο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων/ πολλαπλών φυσικών που υλοποιούμε είναι στα άμεσα μελλοντικά μας σχέδια.

3.1.1. Πειράματα

Για την εξέταση της ορθότητας και της απόδοσης της υλοποίησης, χρησιμοποιείται το ακόλουθο ελλειπτικό πρόβλημα:

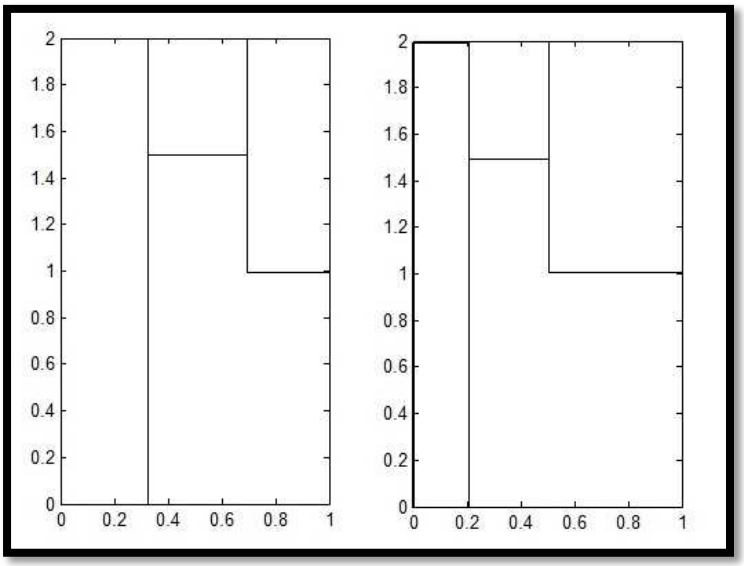
$$\mathrm{Lu}(x,y) \equiv \nabla u(x,y) + \gamma^2 u(x,y) = f(x,y),\ (x,y) \in \Omega$$

$$u(x,y) = u^b(x,y),\ (x,y) \in \Omega$$

με $f(x,y)$ και $u^b(x,y)$ επιλεγμένα έτσι ώστε η πραγματική λύση να είναι:

$$u(x,y) = e^{y(x=4)}x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5) \qquad (3)$$

Πιο συγκεκριμένα μελετώνται δύο διαφορετικά προβλήματα ΜΔΕ που αποτελούνται από την προηγούμενη διαφορική εξίσωση και οριακές συνθήκες και τα δύο διαφορετικά πεδία που αποτυπώνονται στην εικόνα 6.



Εικόνα 2: Τα πεδία του ομοιόμορφου (αριστερά) και του ανομοιόμορφου (δεξιά) προβλήματος

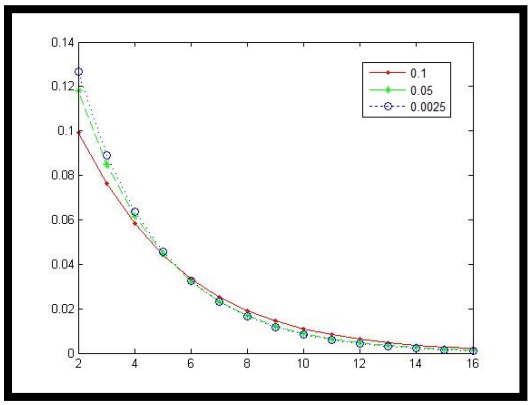
Για το ομοιόμορφο πρόβλημα τα σημεία των διεπαφών είναι στα $x_1 = \frac{1}{3}$ και $x_2 = \frac{2}{3}$ και για το ανομοιόμορφο πρόβλημα στα $x_1 = \frac{1}{5}$ και $x_2 = \frac{1}{2}$ και το $\gamma^2 = 2$. Τα πειράματα εκτελούνται για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακριτοποίησης h, η οποία έχει θεωρηθεί ίση τόσο στην κατεύθυνση x όσο και στην κατεύθυνση y. Τα προκύπτοντα μεγέθη του πλέγματος παρουσιάζονται στον πίνακα 4.

Ομοιόμορφο πρόβλημα				
Περίπτωση	**H**	**Αριστερό υποπεδίο**	**Μεσαίο υποπεδίο**	**Δεξί υποπεδίο**
Π1	**0.1**	**4x21**	4x6	4x11
Π2	**0.05**	**8x41**	8x11	8x21
Π3	**0.025**	**14x81**	14x21	14x41
Π4	**0.0125**	**28x161**	28x41	28x81
Π5	**0.00625**	**55x321**	55x81	55x161
Π6	**0.003125**	**108x641**	108x161	108x321
Π7	**0.0015625**	**214x1281**	214x321	214x641
Ανομοιόμορφο πρόβλημα				
Περίπτωση	**H**	**Αριστερό υποπεδίο**	**Μεσαίο υποπεδίο**	**Δεξί υποπεδίο**
Π1	**0.1**	3x21	4x6	**6x11**
Π2	**0.05**	5x41	7x11	**11x21**
Π3	**0.025**	9x81	13x21	**21x41**
Π4	**0.0125**	17x161	25x41	**41x81**

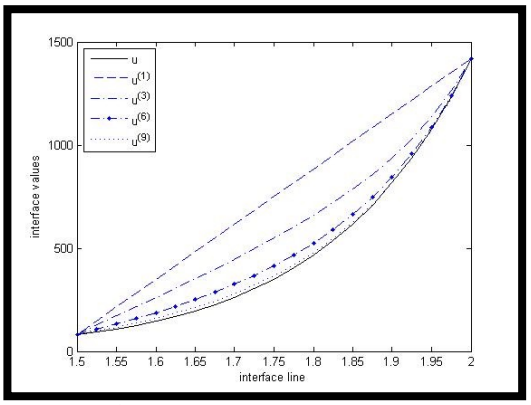
Π5	**0.00625**	33x321	49x81	**81x161**
Π6	**0.003125**	65x641	97x161	**161x321**
Π7	**0.0015625**	129x1281	193x321	**321x641**

Πίνακας 4: Περιπτώσεις ελέγχου που εξετάστηκαν μαζί με το βήμα διακριτοποίησης και το μέγεθος πλέγματος για το αριστερό, μεσαίο και δεξί υποπεδίο του ομοιόμορφου και του ανομοιόμορφου προβλήματος

Το ιστορικό της σύγκλισης αποτυπώνεται στις επόμενες εικόνες. Πιο συγκεκριμένα, στο αριστερό γράφημα παρουσιάζεται η νόρμα μεγίστου της σχετικής διαφοράς διαδοχικών επαναλήψεων για τη διεπαφή $x_1 = \frac{1}{3}$ του ομοιόμορφου προβλήματος για $h = 0.1,\ 0.05,\ 0.025$. Όπως άλλωστε υπόσχεται η μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή, παρατηρούμε ότι ο ρυθμός σύγκλισης είναι ανεξάρτητος του τοπικού βήματος διακριτοποίησης h. Για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για τη διεπαφή $x_1 = \frac{1}{3}$ στο δεξί γράφημα παρουσιάζονται η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις για τις επαναλήψεις 1, 3, 6, 10 για $h = 0.05$.



Εικόνα 3: Η νόρμα μεγίστου της σχετικής διαφοράς διαδοχικών επαναλήψεων για τη διεπαφή x_1=1/3 του ομοιόμορφου προβλήματος για h=0.1,0.05,0.025.



Εικόνα 4: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για τη διεπαφή x_1=1/3 για τις επαναλήψεις 1, 3, 6, 10 για h=0.05.

Στον πίνακα 5 παρουσιάζονται οι συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και της παράλληλης υλοποίησης.

	Π1	**Π2**	**Π3**	**Π4**	**Π5**	**Π6**	**Π7**
Ομοιόμορφο πρόβλημα							
Σειριακή Υλοποίηση	**1.900**	**2.664**	**5.216**	**12.883**	40.883	178.217	996.348
Παράλληλη Υλοποίηση	3.495	4.068	6.140	13.595	**39.808**	**154.633**	**723.731**
Ανομοιόμορφο πρόβλημα							

Σειριακή Υλοποίηση	**2.294**	**2.854**	**5.111**	13.251	37.266	179.561	1057.644
Παράλληλη Υλοποίηση	3.720	4.264	5.732	**10.633**	**34.172**	**126.607**	**918.838**

Πίνακας 5: Χρόνοι συνολικής εκτέλεσης σειριακής και παράλληλης υλοποίησης

Για το ομοιόμορφο πρόβλημα η παράλληλη υλοποίηση αρχίζει να γίνεται γρηγορότερη από την περίπτωση Π5 και μετά, ενώ για το ανομοιόμορφο από την περίπτωση Π4 και μετά. Αυτό είναι λογικό μιας και στο ομοιόμορφο πρόβλημα ένα από τα 3 υποπροβλήματα είναι σημαντικά μεγαλύτερο από τα υπόλοιπα και άρα είναι το κυρίαρχο στο χρόνο εκτέλεσης και της σειριακής και της παράλληλης υλοποίησης.

Η σειριακή εκτέλεση πραγματοποιείται σε έναν κόμβο με 4 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620, 2.00GHz επεξεργαστές και 2GB RAM και η παράλληλη σε 3 κόμβους με την ίδια διαμόρφωση, στην Cloud Υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων, του τμήματος Μηχ/κών Η/Υ και Πληροφορικής.

Ο χρόνος των σειριακών εκτελέσεων περιλαμβάνει το συνολικό χρόνο των υπολογισμών για τα τρία πεδία και τις δύο διεπαφές για 16 γενιές. Στις παράλληλες εκτελέσεις, ο συνολικός χρόνος αντιστοιχεί στο χρόνο που απαιτείται για την επίλυση του μεγαλύτερου από τα τρία υποπεδία μαζί με τους υπολογισμούς για τις διεπαφές και την απαραίτητη επικοινωνία, για 16 γενιές. Οι περιπτώσεις ελέγχου επιλέχτηκαν για να διερευνηθεί η συμπεριφορά της παράλληλης υλοποίησης και όχι για λόγους ακρίβειας. Όσο τα πλέγματα γίνονται λεπτότερα, ο φόρτος εργασίας αυξάνεται σημαντικά, ενώ ο χρόνος επικοινωνίας αυξάνεται με μια τάξη μεγέθους μικρότερη. Αυτός είναι ο κύριος λόγος που κέρδος παρατηρείται για λεπτά πλέγματα.

3.2. Εφαρμογή Υβριδικού Παράλληλου Monte Carlo Επιλυτή Μ.Δ.Ε.

3.2.1. Πειραματικά αποτελέσματα

Έχουμε εκτελέσει έναν εκτενή αριθμό πειραμάτων σε ένα εικονικό cluster 8 μηχανημάτων που τρέχει σε μια OpenStack Cloud υποδομή του υπολογιστικού κέντρου του Τμήματος Υπολογιστών και Πληροφορικής του ΤΕΙ Δυτικής Ελλάδας. Η cloud υποδομή χρησιμοποιεί ένα Dell Blade Enclosure με 16 dual processor Xeon servers, με κάθε επεξεργαστή να έχει 6 hyper-threading πυρήνες και 48 Gbytes κύριας μνήμης. Τα blades είναι διασυνδεδεμένα με 1 GBit Ethernet. Κάθε εικονικό μηχάνημα έχει 4 εικονικές CPUs και 8 GBytes RAM.

Για όλα τα προβλήματα έχουμε δημιουργήσει όλους τους πιθανούς συνδυασμούς εκτέλεσης για το μέγιστο αριθμό νημάτων nt={1, 2, 4, 6, 8} ανά διεργασία np={1, 2, 4, 8, 16, 32, 64} και τον αριθμό των τυχαίων περιπάτων που πραγματοποιούνται ανά κόμβο από τον Monte Carlo αλγόριθμο *walks* = {20K, 40K, 80K, 160K}, ώστε να μπορέσουμε να καθορίσουμε την επιτάχυνση και την κλιμάκωση της προτεινόμενης προσέγγισης. Για το profiling της υβριδικής υλοποίησης έχουμε χρησιμοποιήσει τον mpiP profiler [10] που είναι μια ελαφριά βιβλιοθήκη profiling για MPI εφαρμογές. Επειδή απλά συλλέγει στατιστική πληροφορία για τις MPI συναρτήσεις, το mpiP δημιουργεί σημαντικά λιγότερη επιβάρυνση και πολύ λιγότερα δεδομένα από εργαλεία ανίχνευσης. Όλη η συλλεγόμενη πληροφορία από το mpiP είναι τοπική ανά διεργασία.

Οι Πίνακες 3-10 παρουσιάζουν τους χρόνους εκτέλεσης και ο Πίνακας 11 την επιτάχυνση που επιτεύχθηκε για όλα τα προβλήματα εισόδου.

Πρόβλημα	1						
Np	1	2	4	8	6	2	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	6	8	6	3	3	4	3
80K	9	14	11	5	4	6	5
160K	8	4	19	9	6	6	8

Πίνακας 4: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 1

Πρόβλημα	2						
Np	1	2	4	8	6	2	4
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	26	9	7	4	3	3	4
80K	50	14	10	6	4	5	5
160K	99	25	19	9	6	7	9

Πίνακας 5: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 2

Πρόβλημα	3						
Np	1	2	4	8	6	2	4
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	25	0	5	3	3	2	3
80K	0	6	10	4	3	4	4
160K	9	8	8	8	5	6	6

Πίνακας 6: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 3

Πρόβλημα	4						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	538	183	120	20	62	68	77
80K	931	298	170	88	80	86	90
160K	1777	511	295	124	109	122	129

Πίνακας 7: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 4

Πρόβλημα	5						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	534	183	120	70	62	68	74
80K	946	298	170	88	180	86	90
160K	1757	511	295	124	109	122	129

Πίνακας 8: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 5

Πρόβλημα	6						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	494	176	423	78	72	75	77
80K	847	273	164	97	82	92	94
160K	1550	464	292	135	106	121	30

Πίνακας 9: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 6

Πρόβλημα	7						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	365	176	109	78	72	75	77
80K	713	273	164	97	82	92	94
160K	1416	464	292	135	105	121	130

Πίνακας 10: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 7

Προβλήματα εισόδου							
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	2008	745	610	306	277	295	312
80K	3576	1196	699	385	335	371	382
160K	6796	2037	1230	544	446	505	541

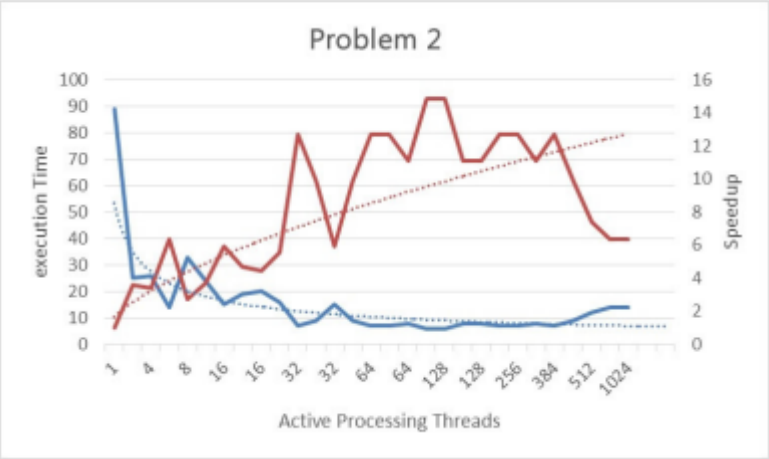
Πίνακας 11: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – άθροισμα

Επιτάχυνση προβλημάτων εισόδου						
Np	2	4	8	16	32	64
Nt	2	4	6	6	8	8
Min	2.81	2.03	6.33	6.86	6.59	6.42
Avg	3.08	4.17	8.85	10.60	9.53	9.12
Max	3.34	5.13	11.48	14.62	12.81	11.92

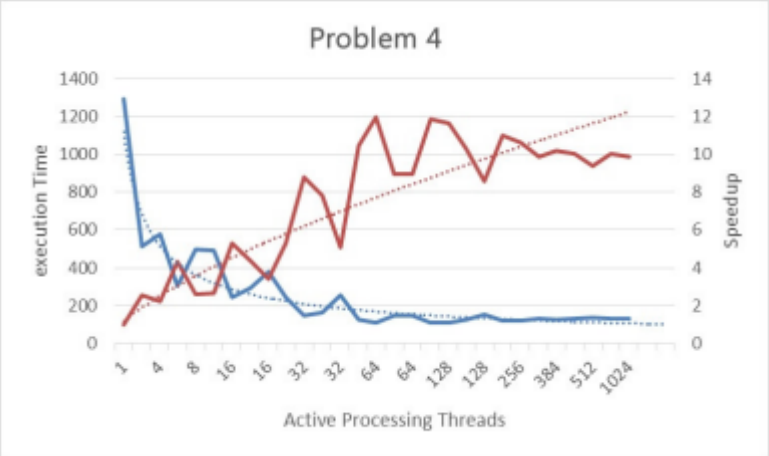
Πίνακας 12: Επιτάχυνση

Η λεπτομερής ανάλυση των εκτελέσεων δείχνει ότι ο αλγόριθμος κλιμακώνεται σχεδόν γραμμικά σε σχέση με τον αριθμό των ενεργών νημάτων επεξεργασίας, δηλαδή τον αριθμό των διεργασιών πολλαπλασιασμένο με τον αριθμό των νημάτων, έως ότου ο χρόνος εκτέλεσης του Monte Carlo μειωθεί σημαντικά λόγω της παραλληλοποίησης και οι υπόλοιποι πυρήνες τώρα κυριαρχούν στο χρόνο εκτέλεσης.

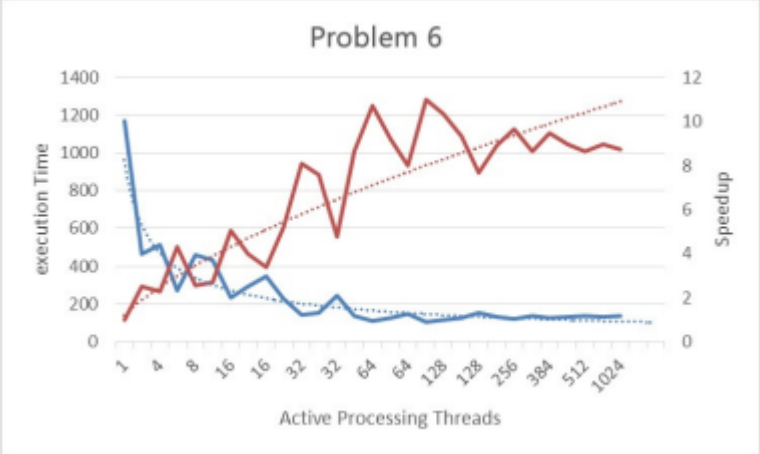
Οι Εικόνες 21-24 παρουσιάζουν την επιτάχυνση και το χρόνο εκτέλεσης για κάποια από τα προβλήματα εισόδου.



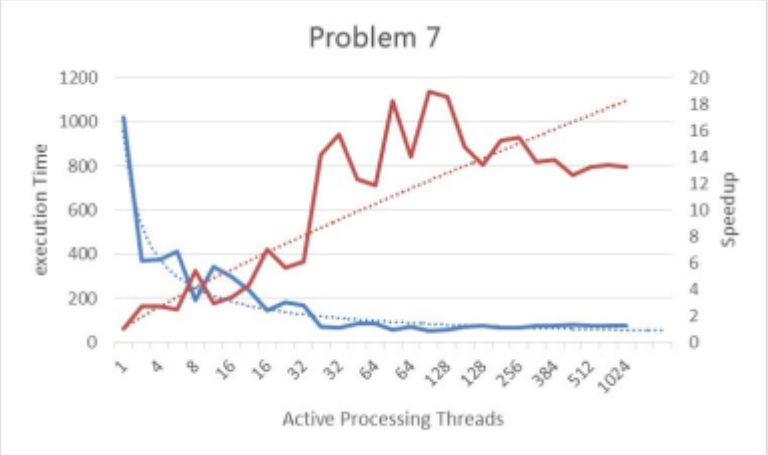
Εικόνα 21: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 2



Εικόνα 22: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 4



Εικόνα 23: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 6



Εικόνα 24: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 7

3.2.2. Συμπεράσματα

Στα προηγούμενα κεφάλαια παρουσιάστηκε η ακολουθιακή απόδοση ενός επιλυτή ΜΔΕ που εφαρμόζεται σε ελλειπτικές ΜΔΕ (στη Poisson συγκεκριμένα) σε ορθογώνια πολλαπλά πεδία τόσο σε δύο όσο και σε τρεις διαστάσεις. Επίσης παρουσιάστηκαν λεπτομέρειες υλοποίησης και επεκτάσεις στον ακολουθιακό αλγόριθμο, ώστε να επιτρέψει την αποδοτική υλοποίηση σε ένα περιβάλλον

κατανεμημένης μνήμης. Τα πειραματικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται δείχνουν ότι μια αποδοτική υλοποίηση του βασικού αλγορίθμου μπορεί να επιτευχθεί σε αρχιτεκτονικές κατανεμημένης μνήμης. Η υβριδική υλοποίηση καταφέρνει να επιδείξει σημαντική επιτάχυνση, ενώ διατηρεί την ποιότητα της λύσης σε δείγματα συνόλων δεδομένων εισόδου. Τα μελλοντικά μας σχέδια περιλαμβάνουν την παραλληλοποίηση του Laplace επιλυτή σε μηχανήματα κατανεμημένης μνήμης και την ενσωμάτωση του υβριδικού αλγορίθμου στην πλατφόρμα FEniCS.

Τα αποτελέσματα αυτής της μελέτης, παρουσιάστηκαν στο διεθνές συνέδριο NUMAN 2014 (Chania, Greece 9/2014) στην εργασία: P. Alefragis, K.A. Spirou and S. Likothanassis: "*Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multi-domains*".

3.3. Αποτελέσματα Ασύγχρονης Υλοποίησης IR Μεθόδων

Προκειμένου να αξιολογηθούν τα αποτελέσματα απόδοσης του προτεινόμενου ασύγχρονου αλγορίθμου, έχουμε υιοθετήσει ένα απλουστευμένο πρόβλημα που αποτελείται από τρία υπο-προβλήματα και δύο διεπαφές.

Περιγράφεται ως εξής:

$$Lu \equiv \nabla^2 u(x,y) + \gamma^2 u(x,y) = f(x,y), (x,y) \in \Omega \quad (2)$$

$$u(x,y) = u^b(x,y), (x,y) \in \partial\Omega$$

πού Ω είναι $\left[0,\frac{1}{3}\right]\times[0,2]\cup\left[\frac{1}{3},\frac{2}{3}\right]\times[1,2]\cup\left[\frac{2}{3},1\right]\times\left[\frac{1}{2},2\right]$, και $f(x,y)$ και $u^b(x,y)$ επιλέγεται έτσι ώστε η αληθινή λύση είναι:

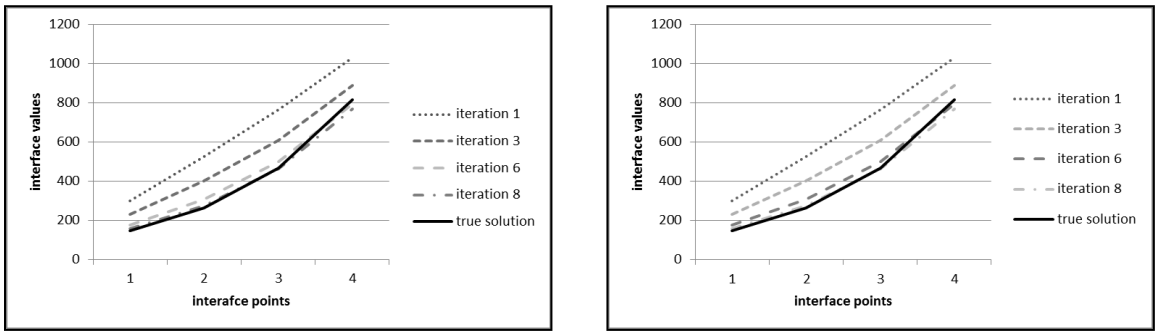
$$u(x,y) = e^{y(x+4)} x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5) \quad (3)$$

Οι διεπαφές είναι $x_1 = \frac{1}{3}, x_2 = \frac{2}{3}$ ενώ $\gamma^2 = 2$. Επτά διαφορετικές περιπτώσεις διαμορφώνονται εξετάζοντας τα διαφορετικά μεγέθη πλέγματος, σύμφωνα με επτά διαφορετικές τιμές της διακριτοποιημένης παραμέτρου h, η οποία θεωρείται ίση και στη x και την y κατεύθυνση. Κάθε διαφορετικό μέγεθος πλέγματος αντιστοιχεί σε έναν διαφορετικό αριθμό σημείων διεπαφών, που αυξάνονται από 6 σε 321. Το αριστερό υπο-πρόβλημα είναι περίπου τέσσερις φορές μεγαλύτερο από το μεσαίο, ενώ το δεξιό είναι περίπου δύο φορές μεγαλύτερο από το μεσαίο υπο-πρόβλημα. Οι δύο διεπαφές έχουν τον ίδιο αριθμό σημείων και επομένως είναι ίσου φόρτου εργασίας.

Τα πειράματα εκτελούνται σε 3 διαφορετικά προκαθορισμένες εικονικές μηχανές. Οι εικονικές μηχανές που χρησιμοποιούνται για τα πειράματα, έχουν 4 εικονικούς πυρήνες και 2GB RAM και τρέχουν σε ένα virtualization XenServer περιβάλλον που εγκαθίσταται σε έναν κεντρικό υπολογιστή με 2 X Intel (P) Xeon (P) KME E5-2620, 2.00GHz.

Η ασύγχρονη εφαρμογή GEO συγκρίνεται με μια σύγχρονη παράλληλη εφαρμογή GEO που παρουσιάστηκε πρόσφατα στην [7] (κεφ. 2.3), από την άποψη της ταχύτητας σύγκλισης και του χρόνου εκτέλεσης.

Τα παρακάτω σχήματα απεικονίζουν την πορεία σύγκλισης της ασύγχρονης εφαρμογής GEO στα εσωτερικά σημεία των διεπαφών. Το ΣΧΗΜΑ 1 (α) απεικονίζει τις ακριβείς και υπολογισμένες λύσεις στις επαναλήψεις 1, 3, 6, 8 στη διεπαφή 1 για την περίπτωση c1. Το ΣΧΗΜΑ 1 (β) παρουσιάζει πορεία σύγκλισης της διεπαφής 1 και της περίπτωσης c1 για το σύγχρονο αλγόριθμο. Τα αποτελέσματα μπορούν να συγκριθούν και κάποιος μπορεί να δει την ομοιότητα των υπολογισμένων λύσεων ανά επανάληψη IR και για τους σύγχρονους και ασύγχρονους αλγορίθμους. Παρόμοια αποτελέσματα ισχύουν για όλες τις περιπτώσεις δοκιμής και των δύο διεπαφών, αποδεικνύοντας τη γρήγορη σύγκλιση GEO.



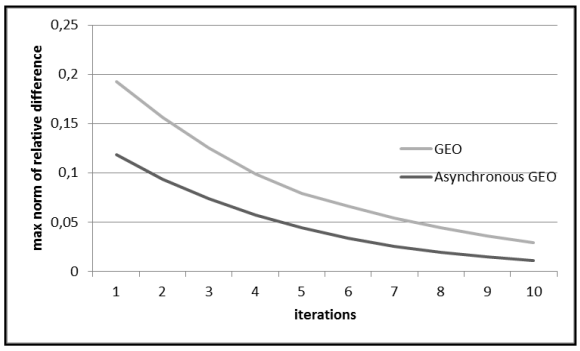
ΣΧΗΜΑ 1. Πραγματική λύση και υπολογισμένες λύσεις στις επαναλήψεις 1, 3, 6, 8 στη διεπαφή 1 για την περίπτωση c1 σε ασύγχρονη **(α)** και σύγχρονη **(β)** GEO.

Στο ΣΧΗΜΑ 2 παρουσιάζεται η max norm της σχετικής διαφοράς των διαδοχικών λύσεων στα σημεία διεπαφών σαν συνάρτηση του αριθμού επαναλήψεων $r_i = \frac{\|u_{i+1} - u_i\|_\infty}{\|u_{i+1}\|_\infty}$. Αφορά τη διεπαφή 1 για την περίπτωση c1 και για το προτεινόμενο ασύγχρονο GEO και για το σύγχρονο GEO. Αν και για τους δύο αλγορίθμους οι αρχικές τιμές στις διεπαφές ua είναι οι ίδιες, αυτό δεν απεικονίζεται στο σχήμα επειδή η πρώτη τιμή είναι $r_1 = \frac{\|u_2 - u_1\|_\infty}{\|u_2\|_\infty}$.Πάλι, τα παρόμοια αποτελέσματα ισχύουν και για όλα τα προβλήματα δοκιμής και τις δύο διεπαφές.

Ο ΠΙΝΑΚΑΣ 1 παρουσιάζει τη σύγκριση των χρόνων εκτέλεσης των δύο εφαρμογών GEO. Για τη σύγχρονη εφαρμογή, ο συνολικός χρόνος αντιστοιχεί στο χρόνο για τη λύση των τριών subdomains μαζί με το χρόνο των υπολογισμών διεπαφών και την απαραίτητη επικοινωνία, για 15 επαναλήψεις, ενώ στην ασύγχρονη εφαρμογή μόνο το μεσαίο subdomain εκτελεί 15 επαναλήψεις. Η σύγκριση των χρόνων εκτέλεσης αποδεικνύει την υψηλή σημασία της ασύγχρονης εφαρμογής, ειδικά καθώς τα πλέγματα γίνονται λεπτότερα και έτσι, τα προβλήματα γίνονται μεγαλύτερα.

Προκειμένου να μελετηθεί και να διευκρινιστεί η συμβολή του προτεινόμενου αλγορίθμου, ως στιγμιαία βήματα για το υιοθετημένο πρόβλημα δοκιμής, προγραμματίζουμε να αναλύσουμε τα timestamps κάθε επανάληψης IR, για κάθε διεπαφή, μέσω της εκτέλεσης του σφαιρικού προβλήματος, και για το σύγχρονο και ασύγχρονο GEO. Θα θεωρήσουμε το σχετικό κανόνα λάθους στις διεπαφές ανά επανάληψη προκειμένου να απεικονιστούν οι διαφορές στη συμπεριφορά των δύο GEO. Τέλος, έχουμε την πρόθεση για τη μελέτη πώς ο φόρτος εργασίας κάθε κόμβου συνδέεται με το χρόνο εκτέλεσης του σφαιρικού προβλήματος, με το χωρισμό και την

ένδειξη του χρόνου για solver PDE, τη μέθοδο IR, το χρόνο επικοινωνίας και το χρόνο μη απασχόλησης και για τους σύγχρονους και τους ασύγχρονους αλγορίθμους.



ΣΧΗΜΑ 2. Ο max norm της σχετικής διαφοράς των διαδοχικών λύσεων στη διεπαφή 1 σαν συνάρτηση του αριθμού επαναλήψεων για την περίπτωση c1 για GEO και ασύγχρονο GEO.

ΠΙΝΑΚΑΣ 1. ΧΡΟΝΟΙ ΕΚΤΕΛΕΣΗΣ ΑΣΥΓΧΡΟΝΟΥ ΚΑΙ ΣΥΓΧΡΟΝΟΥ GEO

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7
ASYNCHRONOUS GEO	12.12	12.361	11.81	7.727	14.805	38.022	256.084
SYNCHRONOUS GEO	3.495	4.068	6.14	13.595	39.808	154.633	723.731

Τα πειραματικά αποτελέσματα δείχνουν ότι η προσωρινή χαλάρωση του βήματος συγχρονισμού μεταξύ των subdomains δεν υποβιβάζει τις ιδιότητες σύγκλισης της διαδικασίας λύσεων και μειώνει σημαντικά το χρόνο εκτέλεσης ρολογιού του αλγορίθμου. Κατά τη διάρκεια των πειραμάτων, περισσότερο από 300% επιταχύνονται επιτεύχθηκαν έναντι της σύγχρονης παράλληλης εφαρμογής. Η μελλοντική εργασία θα περιλάβει την ολοκλήρωση ενός σχήματος υποκλοπής (stealing) φορτίου για την καλύτερη χρησιμοποίηση των υπολογιστικών πόρων για τα προβλήματα όπου τα subdomains είναι αριθμητικά περισσότερα τους υπολογιστικούς πυρήνες και τις εκτενείς πειραματικές δοκιμές με τα πολλαπλά σενάρια στη χρησιμοποίηση των υπολογιστικών πόρων, έναν μεγαλύτερο αριθμό περιοχών που ποικίλλουν στο μέγεθος και τη δυσκολία και τα διαφορετικά σενάρια στη σύνθεση του αρχικού προβλήματος πολλαπλών-περιοχών.

4. Παραδοτέα

Σύμφωνα με το τεχνικό Δελτίο Προτεινόμενης Πράξης, η ΚΕΟ3 για τη Δράση 3.1 είχε τη συμβατική υποχρέωση για τα παρακάτω παραδοτέα.

- 1 Τεχνική Έκθεση
- 3 δημοσιεύσεις
- Το Software παράλληλης υλοποίησης των αλγορίθμων.

Τελικά. Η ΚΕΟ3 σε συνεργασία με τις άλλες 2 ΚΕΟ έχει ολοκληρώσει τα παρακάτω παραδοτέα.

α. Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud

1. 3 Ετήσιες Τεχνικές Εκθέσεις (επισυνάπτονται)

2. 1 Τελική Έκθεση Προόδου

3. 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων σχετικά με το αντικείμενο του έργου. Παρακάτω δίνονται οι αναφορές των άρθρων (το πλήρες κείμενο επισυνάπτεται):

   - ***A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothnassis***, **"Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO"**, Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

   - ***P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, "Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multi-domains"*** Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

   - ***A.Korfiati, N. Sfika, K. Daloukas, C. Alexakos, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis,*** **"IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs",** Proceedings of the World Congress on Engineering 2015 Vol I, pp541-546, 2015 (Awarded with a ***Certificate of Merit***)

   - ***A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis,*** **"An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems",** International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), Rhodes, Greece, Sept. 23-29, 2015 (accepted).

4. Στα πλαίσια του έργου ολοκληρώθηκε μια μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία, από την εξωτερική συνεργάτιδα κα Αίγλη Κορφιάτη, μεταπτυχιακής φοιτήτριας στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα ειδίκευσης "Επιστήμη και τεχνολογία Υπολογιστών", του Τμήματος Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών. Η επίβλεψη της Μ.Δ.Ε. έγινε από τον Επιστημονικό Υπεύθυνο της ΚΕΟ3 καθηγητή Σ. Λυκοθανάση. Το θέμα της εργασίας είναι:

«Σχεδιασμός και υλοποίηση προηγμένων μαθηματικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές».

5. Είναι υπό συγγραφή 1 επιστημονικό άρθρο για υποβολή σε επιστημονικό περιοδικό. Θα αφορά την παραλληλοποίηση των 2 μεθόδων της Interface Relaxation (GEO, ROB) στην Πλατφόρμα FEniCS.

6. Ο κώδικας των παράλληλων υλοποιήσεων των μεθόδων Interface Relaxation και Monte Carlo.

5. Συνεργασίες

Κατά τη διάρκεια του έργου η ΚΕΟ 3, ανέπτυξε τις παρακάτω συνεργασίες:

1. Με την ΚΕΟ 2, σε θέματα υλοποίησης της μεθόδου Interface Relaxation στην πλατφόρμα FEniCS (με την Αν. Καθηγήτρια Γ. Τσομπανοπούλου) και της μεθόδου Monte Carlo σε pThreads (με τον Καθηγητή Μ. Βάβαλη και τον υποψήφιο διδάκτορα Μ. Μαρούδα).
2. Με την ΚΕΟ 1, σε θέματα παράλληλης υλοποίησης της μεθόδου ALOPEX, για την επίλυση του προβλήματος Περιβαλλοντικής Μηχανικής (πρόβλημα υφαλμύρισης).

6. Μελλοντικές Δράσεις

Παρόλο που το έργο ολοκληρώθηκε η ΚΕΟ3 θα συνεχίσει την συνεργασία της με της άλλες δύο ΚΕΟ. Εκτός από τις δράσεις που αναφέρθηκαν στα προηγούμενα (όπως παραλληλοποίηση και άλλων IR μεθόδων και συνδυασμός της μεθόδου Alopex, με IR μεθόδους), στα πλαίσια του έργου είναι σε εξέλιξη η διδακτορική διατριβή της εξωτερικής συνεργάτιδας κας Αίγλης Κορφιάτη. Η κα Κορφιάτη είναι υποψήφια διδάκτωρ στο Μ.Δ.Ε. "Επιστήμη και Τεχνολογία Υπολογιστών", του Τμήματος Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών. Η διατριβή βρίσκεται στο 2^{ο} έτος, υπό την επίβλεψη του Επιστημονικού Υπεύθυνου της ΚΕΟ 3 καθηγητή Σ. Λυκοθανάση και έχει θέμα:

«Σχεδιασμός και υλοποίηση ολοκληρωμένου περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων σε αρχιτεκτονικές υψηλής επίδοσης και εφαρμογές»

7. Βιβλιογραφία

Κεφάλαιο 2.1- 2.2:

[1] C. Kessler and J. Keller, "Models for Parallel Computing: Review and Perspectives", PARS – Mitteilungen 24:Dec.2007, ISSN 0177-0454, GI/ITG PARS.

[2] M. Baker, A. Apon, R. Bayyaa nd H. Jin " Cluster Computing and Applications", 2000, http://www.buyya.com/papers/encyclopedia.pdf.

[3] http://searchdatacenter.techtarget.com/definition/server-blade.

[4] http://searchitchannel.techtarget.com/feature/Using-blade-servers-for-virtualization-clustering.

[5] http://fenicsproject.org/about/.

Κεφάλαιο 2.3:

[1] D. Keyes and W. Gropp. A comparison of domain decomposition techniques for elliptic partial differential equations and their parallel implementation. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 8:s166-s202, 1987.

[2] Tony F. Chan and Tarek P. Mathew. Domain decomposition algorithms. In Acta Numerica 1994, pages 61-43. Cambridge University Press, 1994.

[3] T. F. Chan and D. C. Reasco. A survey of preconditioners for domain decomposition. Technical Report /DCS/RR-414, Yale University, 1985.
[4] P.E. Bjorstad, O. Widlund. To overlap or not overlap: A note on a domain decomposition method for elliptic problems, SIAM J. Sci. Statist Comput. 10 (2) (1989) 1053–1061.
[5] T.F. Chan, D. Goovaerts. On the relationship between overlapping and nonoverlapping domain decomposition methods, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 13 (1992) 663–670.
[6] T. F. Chan, T. Y. Hou, and P. L. Lions. Geometry related convergence results for domain decomposition algorithms. SIAM J. Numer. Anal., 28(2):378-391, 1991.
[7] J.R. Rice, An agent-based architecture for solving partial differential equations, SIAM News 31 (6) (1998).
[8] A. Bamberger, R. Glowinski, and Q. H. Tran. A domain decomposition method for the acoustic wave equation with discontinuous coefficients and grid change. SIAM J. Numer. Anal., 34(2):603-639, 1997.
[9] B. Despres. Domain decomposition method and the Helmholtz problem. In L. Halpern, G. Cohen and P. Joly, editors, Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation Phenomena, pages 44-52. SIAM, 1991.
[10] S. Kim. A parallelizable iterative procedure for the Helmholtz problem. Appl. Numer. Math., 17:411-425, 1995.
[11] J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, E. Vavalis, and D. Yang. Domain decomposition methods for underwater acoustics problems. Technical report, Computer Science Department, Purdue University, W. Lafayette.
[12] D. Yang. A non-overlapping domain decomposition method for elliptic interface problems. Technical Report # 1472, University of Minnesota, 1997.
[13] Drashansky T.: An Agent-Based Approach to Building Multidisciplinary Problem Solving Environments. PhD Thesis, Purdue University, Computer Science Department, (1996).
[14] J. Xu and J. Zou. Non-overlapping domain decomposition methods. Technical report, Mathematics Department, Pennsylvania State University, University Park, PA, 1996.
[15] M. Mu, J.R. Rice, Modeling with collaborating PDE solvers-theory and practice, Computing Systems in Engineering 6 (1995) pp. 87-95.
[16] Αίγλη Κορφιάτη, «Σχεδιασμός και υλοποίηση προηγμένων μαθηματικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές», Μ.Δ.Ε., Μ.Π.Σ. "Επιστήμη και Τεχνολογία Υπολογιστών", τμήμα Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής, Πάτρα, 2014.
[17] J.R. Rice, E. Vavalis, and D. Yang. Analysis of a non-overlapping domain decomposition method for elliptic PDEs. J. Comput. Appl. Math., 87:11-19, 1997.
[18] Tsompanopoulou, P., Vavalis, E.: Analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations. Journal of Computational and Applied Mathematics 226 2, 370–387 (2009).
[19] Logg, A., Mardal, K. A., Wells, G. N. et al.: Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Springer, (2012).
[20] Rabbitmq, 2014. Online. Available: www.rabbitmq.com/documentation.html(accessed July 11, 2014).

[21] Rice, J. R., Tsompanopoulou, P., Vavalis, E.: Interface relaxation methods for elliptic differential equations. Applied Numerical Mathematics 32 2, 219–245 (2000).

Κεφάλαιο 2.4

[1] K. P. Esler, Jeongnim Kim, L. Shulenburger, and D.M. Ceperley "Fully accelerating quantum Monte Carlo simulations of real materials on GPU clusters".
[2] John Strikwerda, "Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations", SIAM, 2nd edition, 2004.
[3] Norma Alias, "Some Parallel Numerical Methods in Solving Partial Differential Equations", submitted 2nd International Conference on Computer Engineering and Technology, 2010.
[4] G. Sarailidis and M. Vavalis, "Hybrid Solvers for Elliptic PDEs on rectangular multi-domains in 2 and 3 dimensions", submitted to Scientific Computing, 2013.
[5] J.M Delaurentis, L.A Romero, "A Monte Carlo method for poisson's equation", Journal of Computational Physics, Volume 90, Issue 1", September 1990, Pages 123-140, ISSN 0021-9991, http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(90)90199-B.
[6] Edgar Gabriel et al. "Open MPI: Goals, Concept, and Design of a Next Generation MPI Implementation", In Proceedings, 11th European PVM/MPI Users' Group Meeting, Budapest, Hungary, September 2004.
[7] SPLINE, a C++ library which constructs and evaluates spline functions. http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/cpp src/spline/spline.html
[8] MBA - Multilevel B-Spline Approximation Library: http://www.sintef.no/Projectweb/Geometry-Toolkits/MBA/
[9] deal.II - an open source finite element library http://www.dealii.org/
[10] mpiP Profiler - a lightweight profiling library for MPI applications. http://mpip.sourceforge.net/
[11] Fenics - The FEniCS Project is a collection of free software with an extensive list of features for automated, efficient solution of differential equations. http://fenicsproject.org/

Κεφάλαιο 2.5

Όπως στο κεφάλαιο 2.3.

Κεφάλαιο 2.6

[1]Chan, T.F., Mathew, T.P., "Domain decomposition algorithms", Acta Numerica 1994, Cambridge University Press, Cambridge, 61-143 (1994)
[2]Keyes, D., Gropp, W., "A comparison of domain decomposition techniques for elliptic partial differential equations and their parallel implementation", SIAM J. Sci. Statist. Comput. 8 s166-s202 (1987)
[3]Rice, J. R., Tsompanopoulou, P., Vavalis, E., "Interface relaxation methods for elliptic differential equations", Applied Numerical Mathematics 32 2, 219–245 (2000)

[4]Rice, J.R., Tsompanopoulou, P. Vavalis, E.A., “Fine Tunning Interface Relaxation Methods for Elliptic Differential Equations”, Applied Numerical Mathematics, 43(4), 459–481 (2002)
[5]Tsompanopoulou, P., Vavalis, E., “An Experimental Study of Interface Relaxation Methods for Composite Elliptic Differential Equations”, Applied Mathematical Modelling, 32 1620–1641 (2008)
[6]Tsompanopoulou, P., Vavalis, E., “Analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations”, Journal of Computational and Applied Mathematics 226 2, 370– 387 (2009)
[7]Korfiati, A., Tsompanopoulou, P., Likothanassis, S., “Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method”, Proceedings of the 6th International Conference on Numerical Analysis, pp 167-173 (2014)

Παράρτημα ΣΤ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 3.2

ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES)

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας Περιεχομένων

1. ΣΚΟΠΟΣ 3

2. ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΙΣ ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΕΣ ΕΤΕΡΟΓΕΝΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ 3

2.1. Τεχνολογία Επεξεργασίας Γραφικών (Graphics Processor Unit, GPU) 3
2.2. Τεχνολογία Επαναδιατασσόμενης Λογικής (Reconfigurable Logic, FPGAs) 5
2.3. Ετερογενή Συστήματα (Heterogeneous Systems) 7

3. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ ΑΝΑΠΤΥΞΗΣ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ ΣΕ ΕΤΕΡΟΓΕΝΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ 7

3.1. Προγραμματισμός εφαρμογών σε GPU (CUDA, OpenCL) 7
3.2. Προγραμματισμός εφαρμογών σε FPGAs 8
4. Υλοποίηση PDEs σε ετερογενές σύστημα CPU/GPU με την χρήση πολυεδρικού μοντέλου 11
4.1. Εισαγωγή 11
4.2. Πολυεδρικό Μοντέλο 11
4.3. Πλαίσιο ανάλυσης διαχείρισης δεδομένων 12
4.4. Αποτελέσματα της μεθόδου για PDEs 16

5. ΧΡΗΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΠΑΡΑΛΛΗΛΟΥ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΥ OPENCL ΓΙΑ ΣΥΝΘΕΣΗ ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΩΝ (SILICON OPENCL) 19

5.1. Πρώτη φάση του SOpenCL 20
5.2. Δεύτερη φάση του SOpenCL 21
5.3. Instruction clustering 24
5.1. Αποτελέσματα του SOpenCL στα μετροπρογράμματα OpenDwarfs 25

6. ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ PDES ΜΕ ΤΕΧΝΙΚΕΣ MONTE CARLO ΣΕ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ FPGA 25

6.1. Εξερεύνηση του Χώρου Λύσεων της Σχεδίασης 27
6.2. Αριθμητικά αποτελέσματα - Πειράματα 30
6.2.1. Μεθοδολογία 30
6.2.2. Αποτελέσματα 31

7. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ 35

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1. Σκοπός

Ο σκοπός της Δράσης 3.2 είναι η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε αρχιτεκτονικές επεξεργασίας γραφικών (Graphics Processor Units, GPU) καθώς και σε επαναδιατασσόμενες (reconfigurable) αρχιτεκτονικές (πχ. Field Programmable Gate Arrays, FPGAs).

Στόχος της μελέτης θα είναι να εκτιμηθεί η καταλληλόλητα του κάθε πακέτου λογισμικού (συνολικά ή κατά τμήματά του) για εκτέλεση σε καθεμιά από τις πολυπύρηνες πλατφόρμες που θα επιλεγούν ως πειραματικές πλατφόρμες στο έργο, ή εναλλακτικά για επιτάχυνση με χρήση εξειδικευμένου κατά περίπτωση αναδιατασσόμενου υλικού.

Με βάση τα αποτελέσματα της μελέτης θα μεταφερθούν και απεικονιστούν τα πακέτα λογισμικού – είτε καθολικά, είτε κατά τμήματα - στα κατάλληλα κατά περίπτωση πολυπύρηνα συστήματα. Επίσης θα κατασκευαστεί εξειδικευμένο υλικό για την επιτάχυνση συγκεκριμένων υπολογιστικών πυρήνων των εφαρμογών και το απαραίτητο λογισμικό για την επικοινωνία με τον υπολογιστή ξενιστή (Host computer).

Συγκεκριμένα για την υλοποίηση σε FPGA, ενδέχεται να χρησιμοποιηθεί λογισμικό CAD που θα αναπτυχθεί στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας. Το λογισμικό αυτό μετατρέπει εφαρμογές που έχουν αναπτυχθεί σε OpenCL σε επιταχυντές υλικού (hardware accelerators). Με αυτόν τον τρόπο επιταχύνει κατά πολύ την ανάπτυξη ενός συστήματος FPGA χωρίς να χρειάζονται γνώσεις της αρχιτεκτονικής του συστήματος.

Ως ενδεικτικές πολυπύρηνες πλατφόρμες προτείνονται οι επεξεργαστές γενικού σκοπού της Intel ή της AMD καθώς και GPUs της NVIDIA ή της ATI. Ως ενδεικτική πλατφόρμα αναδιατασσόμενης λογικής προτείνονται συστήματα τα οποία περιλαμβάνουν Xilinx FPGA και μικροεπεξεργαστή σε κάρτα PCI-Express και μπορούν να τοποθετηθούν σε σύστημα αρχιτεκτονικής x86 ή συμβατό.

2. Εισαγωγή στις αρχιτεκτονικές ετερογενών συστημάτων

Σε αυτό το κεφάλαιο θα κάνουμε μία ανασκόπηση των βασικών επεξεργαστικών μονάδων που θα χρησιμοποιηθούν στην Δράση 3.2 του MATENVMED.

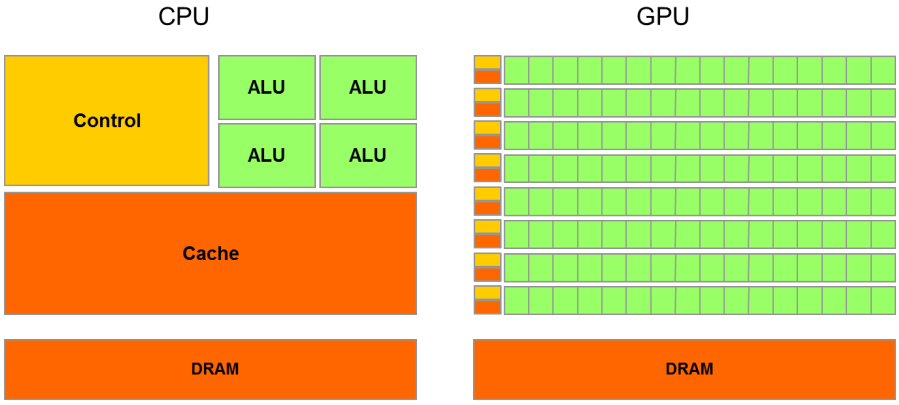
2.1. Τεχνολογία Επεξεργασίας Γραφικών (Graphics Processor Unit, GPU)

Η GPU είναι ένας σύγχρονος πολυεπεξεργαστής (multicore) με υψηλό βαθμό παραλληλίας [4]. Μία σύγχρονη GPU διαθέτει μία ενοποιημένη αρχιτεκτονική για γραφικά και υπολογιστική που χρησιμοποιείται και ως προγραμματιζόμενος

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επεξεργαστής. Οι αρχιτεκτονικές GPU βασίζονται σε παράλληλες διατάξεις πολλών και σχετικά απλών προγραμματιζόμενων επεξεργαστών (Streaming Processors, SPs).

Σε σύγκριση με τις πολυπύρηνες CPUs (multicore CPUs), οι GPUs έχουν πολύ μεγαλύτερο αριθμό πυρήνων (cores) με διαφορετικό στυλ αρχιτεκτονικής που εστιάζει στην αποδοτική εκτέλεση πολλών νημάτων (threads). Με την χρήση πολλών απλούστερων πυρήνων και με την βελτιστοποίηση της συμπεριφοράς της παραλληλίας δεδομένων μεταξύ ομάδων νημάτων, μεγαλύτερο μέρος των τρανζίστορ του κάθε chip είναι αφιερωμένο σε υπολογισμούς, και μικρότερο σε μνήμες και σε



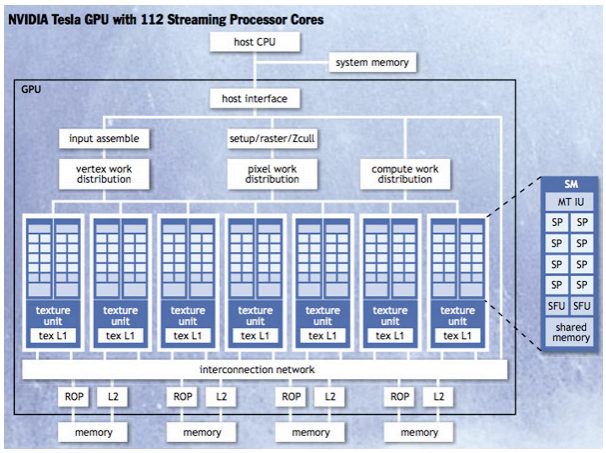
Εικόνα 1. Βασικές αρχές της αρχιτεκτονικής της CPU και της GPU

υλικό ελέγχου (Control) όπως φαίνεται στην Εικόνα 1.

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 2, μία σύγχρονη GPU περιέχει πολλούς πυρήνες επεξεργαστών. Ο επεξεργαστής της Εικόνα 2 αποτελείται από 112 επεξεργαστές συνεχούς ροής (Streaming Processors, SPs) οι οποίοι είναι οργανωμένοι ως 14 πολυνηματικοί πολυεπεξεργαστές συνεχούς ροής (Streaming Multiprocessors, SMs). Κάθε SP εκτελεί σε κάθε χρονική στιγμή και ένα νήμα (thread) της γλώσσας CUDA που θα περιγραφεί στο επόμενο κεφάλαιο. Κάθε SM έχει οκτώ πυρήνες SP, δύο μονάδες ειδικών μαθηματικών συναρτήσεων (Special Function Units, SFUs), κρυφές μνήμες cache εντολών και σταθερών, μία Multithreaded Μονάδα εντολών και μία κοινόχρηστη μνήμη η οποία μπορεί να προσπελασθεί από όλα τα SPs που ανήκουν στο δεδομένο SM. Αυτή είναι η βασική αρχιτεκτονική Tesla που υλοποιείται στην GeForce 8800 GPU της NVIDIA. Στην ενοποιημένη αυτή αρχιτεκτονική \εκτελούνται τα παραδοσιακά προγράμματα γραφικών για σκίαση κορυφών, γεωμετρικών σχημάτων και pixels καθώς και προγράμματα γενικότερης υπολογιστικής μέσω της γλώσσας προγραμματισμού CUDA αλλά και της OpenCL.

Η Εικόνα 2 δείχνει 7 ομάδες από SMs όπου δύο SMs μοιράζονται μία μονάδα επεξεργασίας υφής (texture unit) και μία μνήμη L1 cache για δεδομένα (data). Το texture unit παραδίδει φιλτραρισμένα αποτελέσματα στον SM με δεδομένο ένα σύνολο συντεταγμένων ενός χάρτη υφής (texture map). Η μνήμη L1 cache χρησιμεύει

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 2. Βασική αρχιτεκτονική της NVIDIA Tesla GPU.

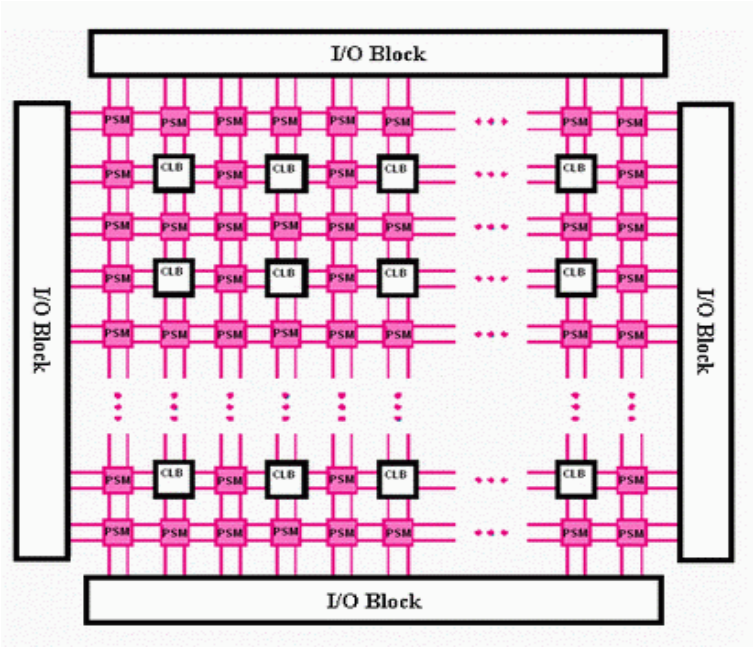
για να μειώσει τον αριθμό των προσπελάσεων από τα SPs στην κύρια μνήμη (DRAM). Ο αριθμός των επεξεργαστών και ο αριθμός των μνημών μπορούν να προσαρμοσθούν ώστε να σχεδιάζονται συστήματα GPU για διαφορετική απόδοση και διαφορετικό κόστος.

Ένα βασικό χαρακτηριστικό της αρχιτεκτονικής GPU είναι ότι όλα τα SPs ενός SM εκτελούν την ίδια εντολή κάθε χρονική στιγμή, πιθανώς με διαφορετικά δεδομένα. Υλοποιεί δηλ. η GPU ένα σύστημα Single Instruction Multiple Data (SIMD). Αυτός ο περιορισμός βοηθάει στην μείωση του instruction bandwidth και ουσιαστικά κάνει δυνατή την ταυτόχρονη εκτέλεση μεγάλου αριθμού νημάτων (threads) σε κάθε κύκλο μηχανής.

2.2. Τεχνολογία Επαναδιατασσόμενης Λογικής (Reconfigurable Logic, FPGAs)

Τα ολοκληρωμένα κυκλώματα επαναδιατασσόμενης λογικής (reconfigurable logic) στα οποία ανήκουν και οι FPGAs (Field Programmable Logic Arrays), περιλαμβάνουν συστοιχίες από υπολογιστικά κυκλώματα (CLBs) η λειτουργικότητα των οποίων μπορεί να μεταβληθεί πολλές φορές κατά τον χρόνο ζωής τους [1]. Ουσιαστικά αυτά τα υπολογιστικά κυκλώματα είναι Lookup Tables (LUTs) με N εισόδους (συνήθως το N είναι μεταξύ 4 και 6) και τα οποία μπορούν να υλοποιήσουν οποιαδήποτε συνδυαστική συνάρτηση boole με N εισόδους. Αυτά τα υπολογιστικά κυκλώματα προγραμματίζονται μέσω configuration bits και συνδέονται μεταξύ τους μέσω πόρων διασύνδεσης (interconnects) που επίσης μπορούν να προγραμματιστούν μέσω configuration bits (Εικόνα 3). Με αυτόν τον τρόπο οποιοσδήποτε αλγόριθμος μπορεί να απεικονισθεί στις συστοιχίες λογικών κυκλωμάτων με το να υπολογίσουμε πρώτα την λογική boolean συνάρτηση του αλγορίθμου, να την απεικονίσουμε στο λογικό κύκλωμα και μετά να διασυνδέσουμε τα λογικά κυκλώματα μεταξύ τους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 3. Η αρχιτεκτονική της FPGA.

Αν και η βασική αρχιτεκτονική της Εικόνα 3 παραμένει σχεδόν αναλλοίωτη σε διαδοχικές γενιές κυκλωμάτων επαναδιατασσόμενης λογικής, οι σύγχρονες FPGA περιλαμβάνουν επιπλέον διατάξεις που έχουν πολύ πιο συγκεκριμένη λειτουργικότητα. Τέτοιες διατάξεις είναι οι εξής:

- Εσωτερικές μνήμες SRAM. Κάθε FPGA περιέχει έναν μεγάλο αριθμό από μνήμες οι οποίες μπορούν να προσπελασθούν σε έναν κύκλο μηχανής. Οι μνήμες προσφέρουν πολύ μεγάλο bandwidth στην εφαρμογή γιατί γλυτώνουν το σύστημα από χρονοβόρες και κοστοβόρες προσπελάσεις σε εξωτερικές μνήμες DRAM.
- Μονάδες για Digital Signal Processing (DSP). Οι μονάδες αυτές αποτελούνται από κυκλώματα πολλαπλασιαστών και προσθετών (multiply-add) που είναι αφιερωμένα στο να επιτελούν πολύ γρήγορες πράξεις σε εφαρμογές όπως DSP filtering.
- Ολόκληροι επεξεργαστές και περιφερειακά. Οι σύγχρονες FPGAs έχουν φτάσει σε τέτοιο βαθμό ολοκλήρωσης ώστε είναι δυνατόν να περιέχουν ολόκληρα συστήματα όπως επεξεργαστές ARM και ακόμα και GPUs. Για παράδειγμα, η Zynq FPGA από την Xilinx και την ARM συνδυάζει σε ένα τσιπ έναν διπύρηνο επεξεργαστή ARM Cortex-A9 με τα παραδοσιακά υπολογιστικά κυκλώματα (CLBs) [2]. Αυτή η FPGA μπορεί να τρέξει οποιοδήποτε λειτουργικό σύστημα το οποίο έχει τρέξει στον ARM (πχ Linux) και χρησιμοποιεί τα CLBs κυρίως για την δημιουργία επιταχυντών υλικού (hardware accelerators).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.3. Ετερογενή Συστήματα (Heterogeneous Systems)

Στην σύγχρονη υπολογιστική, ο όρος Ετερογενή Συστήματα (Heterogeneous Systems) αναφέρεται σε υπολογιστικές πλατφόρμες οι οποίες αποτελούνται από ανόμοιους επεξεργαστές. Για παράδειγμα μπορεί να αποτελούνται από συμβατικές πολυπύρηνες CPUs, από GPUs και τώρα τελευταία ακόμα και από FPGAs. Η χρήση διαφορετικών αρχιτεκτονικών σε μία ετερογενή πλατφόρμα έχει επεκταθεί τα τελευταία χρόνια κυρίως λόγω της ανάγκης για αύξηση της ταχύτητας αλλά και της ενεργειακής απόδοσης ενός τέτοιου συστήματος.

Με το να χρησιμοποιούμε ακριβώς τον επεξεργαστή που χρειαζόμαστε για να επιλύσουμε ένα πρόβλημα μπορούμε να επιτύχουμε μείωση της κατανάλωσης ισχύος και ενέργειας στο ποσό που απαιτείται ακριβώς για να επιλυθεί το πρόβλημα. Από την άλλη μεριά όμως, η χρήση διαφορετικών αρχιτεκτονικών δυσκολεύει την ανάπτυξη λογισμικού για ένα τέτοιο σύστημα, μιας και η μηχανικοί λογισμικού θα πρέπει να αναπτύσσουν εφαρμογές χρησιμοποιώντας διαφορετικά εργαλεία για κάθε επεξεργαστή.

Για να επιλυθεί το πρόβλημα του προγραμματισμού εφαρμογών σε ετερογενή συστήματα, η βιομηχανία υπολογιστών δημιούργησε προγραμματιστικά μοντέλα τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προγραμματισμό διαφορετικών αρχιτεκτονικών. Για παράδειγμα, η OpenCL επεκτείνει την γλώσσα C και ορίζει ένα Application Programming Interface (API) το οποίο επιτρέπει σε προγράμματα να τρέχουν σε έναν Host επεξεργαστή (στην CPU) και να δημιουργούν παράλληλους πυρήνες (kernels). Αυτοί οι πυρήνες μπορούν να στέλνονται για εκτέλεση είτε σε μία συμβατική CPU, είτε σε GPUs είτε ακόμα και σε FPGAs. Τα προγράμματα σε OpenCL μπορούν να μεταγλωττιστούν κατά την διάρκεια της εκτέλεσης του προγράμματος (run-time compilation) γεγονός που κάνει τις εφαρμογές σε OpenCL φορητές (portable) για διαφορετικές αρχιτεκτονικές.

3. Μεθοδολογία ανάπτυξης εφαρμογών σε ετερογενή συστήματα

3.1. Προγραμματισμός εφαρμογών σε GPU (CUDA, OpenCL)

Το μοντέλο προγραμματισμού της CUDA (ή OpenCL) επεκτείνει τις γλώσσες προγραμματισμού C και C++ ώστε να εκμεταλλεύονται τους υψηλότερους βαθμούς παραλληλίας που υπάρχουν στις GPUs. Από την αρχική κυκλοφορία της CUDA το 2007, πολλοί προγραμματιστές ανέπτυξαν προγράμματα σε CUDA/OpenCL για μια ευρεία γκάμα εφαρμογών μεταξύ των οποίων multimedia, επεξεργασία σεισμικών δεδομένων, ταξινόμηση, αναζήτηση, υπολογιστική χημεία κοκ.

Ο προγραμματιστής CUDA γράφει ένα σειριακό πρόγραμμα που καλεί παράλληλους πυρήνες (kernels) οι οποίοι μπορεί να είναι από απλές συναρτήσεις μέχρι πλήρη προγράμματα. Ένας πυρήνας εκτελείται παράλληλα από ένα σύνολο

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

παράλληλων νημάτων (threads) έτσι ώστε κάθε νήμα να εκτελείται σε ένα SP σε κάθε χρονική στιγμή. Ο προγραμματιστής οργανώνει αυτά τα νήματα σε μία ιεραρχία μπλοκ νημάτων και πλέγματα από μπλόκς. Ένα τέτοιο μπλοκ νημάτων (thread block) είναι ένα σύνολο από ταυτόχρονα νήματα που μπορούν να συνεργαστούν μέσω συγχρονισμού barrier και μέσω κοινής πρόσβασης σε ένα χώρο μνήμης ιδιωτικό για το μπλοκ. Ένα πλέγμα (grid) είναι ένα σύνολο από μπλοκ νημάτων που το καθένα (μπλοκ) μπορεί να εκτελείται ανεξάρτητα και για αυτόν τον λόγο μπορούν να εκτελούνται παράλληλα.

Όταν καλεί έναν πυρήνα, ο προγραμματιστής καθορίζει τον αριθμό των νημάτων ανά μπλοκ και των αριθμό των μπλοκ που αποτελούν το πλέγμα. Κάθε νήμα λαμβάνει έναν μοναδικό αριθμό ταυτότητας νήματος (thread ID) *threadIdx* μέσα στο μπλοκ νημάτων που ανήκει με αρίθμηση `0, 1, 2, … ,blockDim-1`, και κάθε μπλοκ νημάτων λαμβάνει έναν μοναδικό αριθμό ταυτότητας μπλοκ (block ID) *blockIdx* μέσα στο πλέγμα που ανήκει. Για ευκολία, τα μπλοκ νημάτων μπορούν να έχουν μέχρι και 3 διαστάσεις και προσπελαύνονται μέσω των πεδίων .x, .y και .z.

Όλα τα παραπάνω μπορούν να φανούν με ένα απλό παράδειγμα στο οποίο θέλουμε να προσθέσουμε δύο πίνακες μίας διάστασης (Εικόνα 4). Οι πίνακες είναι κινητής υποδιαστολής απλής ακρίβειας.

Στο δεξί μέρος της Εικόνα 4 ο κώδικας CUDA είναι ο πυρήνας που εκτελεί κάθε νήμα (thread). Όταν ο προγραμματιστής καλεί τον πυρήνα `vadd` από τον κώδικα του Host, το σύστημα χρόνου εκτέλεσης (run time system) της CUDA δημιουργεί έναν αριθμό νημάτων και κάθε νήμα εκτελεί την δική του εκδοχή του πυρήνα. Σε κάθε νήμα αντιστοιχεί ένα διαφορετικό `idx` και κάθε νήμα επεξεργάζεται και διαφορετικό κομμάτι των πινάκων a, b, και c. Η εκτέλεση ενός thread ανατίθεται σε ένα συγκεκριμένο SP στην GPU.

```
void add(int* a,
     int* b,
     int* c) {
for (int idx=0;idx<sizeof(a);
idx++)
  c[idx] = a[idx] + b[idx];
}
```

```
__kernel void vadd(
     __global int* a,
     __global int* b,
     __global int* c) {
 idx = threadIDx.x +
    blockDim.x *blockIdx.x;
 c[idx] = a[idx] + b[idx];
}
```

Εικόνα 4. Κώδικας πρόσθεσης δύο διανυσμάτων σε C (αριστερά) και σε CUDA (δεξιά)

3.2. Προγραμματισμός εφαρμογών σε FPGAs

Προγραμματισμός με HDL

Η ανάπτυξη κυκλωμάτων σε FPGAs είναι μια επίπονη και χρονοβόρα διαδικασία επειδή απαιτεί από τον σχεδιαστή γνώσεις λεπτομερείς γνώσεις υλικού (hardware) και αρχιτεκτονικής. Ο σχεδιαστής θα πρέπει να αναλύσει τις προδιαγραφές του

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

προβλήματος που πρέπει να αναλύσει, να χωρίσει το πρόβλημα σε μικρότερα προβλήματα και να υλοποιήσει το κάθε ένα από αυτά με την χρήση γλωσσών περιγραφής υλικού (Hardware Description Languages, HDL) όπως η Verilog και η VHDL. Οι γλώσσες αυτές περιγράφουν την αρχιτεκτονική του συστήματος με αρκετά μεγάλη λεπτομέρεια σε επίπεδο κύκλων ρολογιού και ως εκ τούτου είναι ακατάλληλες για χρήση από προγραμματιστές λογισμικού που προτιμούν να μην εισέρχονται σε τόσο μεγάλες λεπτομέρειες και σε τόσο χαμηλό επίπεδο κοντά στο hardware. Η υλοποίηση ενός αλγορίθμου σε FPGA απαιτεί τόσο αυτόν κάθε αυτό το σχεδιασμό του αλγορίθμου σε κάποια γλώσσα περιγραφής υλικού όσο και καλή γνώση του τρόπου με τον οποίο τα δεδομένα της εφαρμογής προσπελαύνονται.

Η διαδικασία σχεδίασης ενός αλγορίθμου σε υλικό διαφέρει κατά πολύ από την ανάπτυξη εφαρμογών λογισμικού. Κατά την πλειοψηφία θεωρείται πιο δύσκολη και περισσότερο στρυφνή εφόσον δεν συγχωρεί πολλές παραβλέψεις που κάνουν οι προγραμματιστές λογισμικού. Μία πολύ σημαντική διαφορά μεταξύ λογισμικού και υλικού είναι πως το δεύτερο είναι εν γένει παράλληλο. Έτσι για να γίνει ακόμα καλύτερη εκμετάλλευση των δυνατοτήτων ενός προσαρμοσμένου hardware accelerator χρειάζεται η υλοποίηση να χαρακτηρίζεται από παραλληλία πράξεων.

Η σημασία της γνώσης σχετικά με τον τρόπο με τον οποίο τα δεδομένα μιας εφαρμογής προσπελαύνονται γίνεται εμφανής αν σκεφτεί κανείς πως η μεταφορά και διαχείριση τμημάτων μνήμης παίζει πολύ μεγάλο ρόλο στην απόδοση ενός αλγορίθμου. Στην περίπτωση των hardware accelerators υπό την μορφή FPGA το πρόβλημα γίνεται μεγαλύτερο επειδή η διαθέσιμη μνήμη είναι προδιαγεγραμμένη και σε σύγκριση με ένα τυπικό υπολογιστή κατά πολύ μικρότερη. Έτσι σε περιπτώσεις στις οποίες δεν γίνεται εκμετάλλευση του μοτίβου προσπέλασης δεδομένων, ένας αλγόριθμος μπορεί φαινομενικά να απαιτεί περισσότερη μνήμη από όση είναι διαθέσιμη σε μία δεδομένη FPGA και έτσι να μην είναι δυνατή η σύνθεσή του. Αν όμως αποδειχθεί με μαθηματικό τρόπο πως από η πραγματική απαίτηση μνήμης είναι μικρότερη από τη φαινομενική τότε γίνεται εφικτή η σύνθεση του σε μία FPGA.

Πέρα από το παραπάνω πρακτικό μέρος η γνώση που σχετίζεται με το μοτίβο προσπέλασης μνήμης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για περαιτέρω βελτίωση της απόδοσης ενός αλγορίθμου. Εφόσον αναγνωρισθούν τα στοιχεία ενός πίνακας που διαβάζονται από κάποιο κομμάτι κώδικα υλοποιημένο ως hardware accelerator τότε μπορούμε να μειώσουμε το κόστος μεταφοράς μνήμης από τον επεξεργαστή στον hardware accelerator με το να μεταφέρουμε μόνο τα χρήσιμα στοιχεία της μνήμης που αντιστοιχεί στον δεδομένο πίνακα. Αντίστοιχη διαδικασία χρησιμοποιείται για την μεταφορά των αποτελεσμάτων από τον hardware accelerator πίσω στον επεξεργαστή, με το να αναγνωρίζονται και να μεταφέρονται μόνο κομμάτια μνήμης που αντιστοιχούν σε αποτελέσματα που παρήγαγε ο hardware accelerator κατά την εκτέλεσή του.

Προγραμματισμός με C/OpenCL – High Level Synthesis tools

Για να γίνουν οι FPGAs ελκυστικές στο επικρατούσα υπολογιστική (mainstream computing) ή και στην υπολογιστική υψηλών επιδόσεων (high performance computing) θα πρέπει να χρησιμοποιήσουν για τον προγραμματισμό τους μοντέλα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

πλησιέστερα στα μοντέλα ανάπτυξης λογισμικού. Αυτό γίνεται επιτακτική ανάγκη λόγω της δυνατότητας των FPGAs να ενσωματώνονται σε συστήματα που αποτελούνται από CPU και GPUs και να προσφέρουν υψηλότερη απόδοση και ενεργειακή αποδοτικότητα.

Για λόγους αύξησης της αποδοτικότητας των σχεδιαστών αλλά κυρίως λόγω της επιθυμίας να επεκταθεί ο αριθμός των σχεδιαστών FPGA και σε προγραμματιστές λογισμικού, έχει δημιουργηθεί μια μεγάλη ώθηση τα τελευταία χρόνια σε εργαλεία σχεδίασης υψηλού επιπέδου (High Level Synthesis Tools). Τα εργαλεία αυτά δίνουν την ευκαιρία στον χρήστη να εκφράσει το κύκλωμα που θέλει να υλοποιήσει σε μια FPGA σε κάποια γλώσσα προγραμματισμού υψηλού επιπέδου όπως C, C++, OpenCL και να αναλάβουν την μετάφραση του προγράμματος αυτού σε γλώσσα HDL, Verilog ή VHDL. Εκτός από τον ίδιο τον αλγόριθμο σε κάποια γλώσσα σαν την C, ο σχεδιαστής θα πρέπει να καθορίσει και διάφορους περιορισμούς στο τελικό του κύκλωμα όπως χρόνο απόκρισης (latency), throughput, συχνότητα ρολογιού, αλλά και το μέγεθος του τελικού κυκλώματος σε αριθμό βασικών συστατικών στοιχείων. Αυτοί οι περιορισμοί καθοδηγούν ένα High Level Synthesis Tool στο να δημιουργήσει το κατάλληλο τελικό κύκλωμα σε HDL.

Στην συνέχεια, μια σειρά από εργαλεία CAD μετατρέπουν το HDL κύκλωμα σε λογικές πύλες (gate level netlist) και από εκεί το τοποθετούν στα υπάρχοντα υπολογιστικά κυκλώματα (CLBs) αφού το διασυνδέσουν μέσω των διαύλων διασύνδεσης (interconnects). Το τελικό αποτέλεσμα είναι ένα configuration file το οποίο περιέχει όλα τα configuration bits που διαμορφώνουν την λειτουργικότητα των CLBs και των διασυνδέσεων.

Βασιζόμενοι σε όλες τις προηγούμενες παρατηρήσεις, είναι σκοπός μας να εξετάσουμε την δυνατότητα χρήσης γλωσσών όπως η OpenCL για την απεικόνιση αλγορίθμων σε FPGAs. Πηγαίνοντας ένα βήμα παραπέρα, θα χρησιμοποιήσουμε τον ίδιο κώδικα OpenCL ή C για εκτέλεση σε όλες τις υπολογιστικές πλατφόρμες που θα χρησιμοποιηθούν για το project. Αυτό θα γίνει δυνατόν μέσω λογισμικού CAD που αναπτύσσεται στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας και που υλοποιεί τεχνικές High Level Synthesis για την δημιουργία επιταχυντών υλικού από προγράμματα OpenCL [3]. Στα πλαίσια του project, το SOpenCL θα βελτιωθεί ώστε να παράγει βέλτιστο υλικό για τους συγκεκριμένους αλγόριθμους που θα παραχθούν στα πλαίσια του project.

Εκτός του SOpenCL θα δοκιμασθούν και εμπορικά εργαλεία High Level Synthesis όπως το Vivado HLS το οποίο αποτελεί και το στάνταρντ εργαλείο για Xilinx FPGAs. Το Vivado HLS δέχεται σαν είσοδο ένα πρόγραμμα γραμμένο σε C ή C++ καθώς και οδηγίες από τον προγραμματιστή μέσω #pragmas που υποδεικνύουν στο εργαλείο τις βελτιστοποιήσεις στην απόδοση ή στο μέγεθος του παραγόμενου υλικού που θα πρέπει να γίνουν.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

4. Υλοποίηση PDEs σε ετερογενές σύστημα CPU/GPU με την χρήση πολυεδρικού μοντέλου

4.1. Εισαγωγή

Όπως είδαμε προηγουμένως, τα ετερογενή συστήματα γίνονται ολοένα και πιο δημοφιλή στην υπολογιστική υψηλών επιδόσεων κυρίως λόγω της δυνατότητας τους να συνδυάζουν υψηλή ταχύτητα με σχετικά χαμηλή κατανάλωση ισχύος. Το σημαντικότερο πρόβλημα τους είναι ότι επιβαρύνουν τον προγραμματιστή όχι μόνο με την εύρεση και εκμετάλλευση του παραλληλισμού σε μια εφαρμογή αλλά επίσης και με την ευθύνη της μεταφοράς δεδομένων από τον χώρο διευθύνσεων ενός επεξεργαστή (πχ CPU) στον χώρο διευθύνσεων ενός διαφορετικού επεξεργαστή (πχ GPU). Ακόμα χειρότερα, η μεγάλη διαφοροποίηση μεταξύ αρχιτεκτονικών και μνημών στα ετερογενή συστήματα αναγκάζουν πολλές φορές τον προγραμματιστή να δημιουργήσει πολλές διαφορετικές εκδοχές ενός κώδικα για να μπορέσει να καλύψει όλες τις περιπτώσεις.

Για να υλοποιήσουμε τον αλγόριθμο επίλυσης PDEs μέσω τεχνικών Monte Carlo, αποφασίσαμε να χρησιμοποιήσουμε το προγραμματιστικό μοντέλο OpenCL που στοχεύει ακριβώς τα ετερογενή συστήματα. Επιπλέον δημιουργούμε ένα πλαίσιο που συνδυάζει compile-time στατική ανάλυση με run-time δυναμική ανάλυση της ροής των δεδομένων μιας εφαρμογής για να αυτοματοποιήσει την διαχείριση δεδομένων σε ετερογενή συστήματα CPU και GPU. Πέρα από την αυτόματη διαχείριση δεδομένων, το πλαίσιο αυτό βοηθάει στην κατανομή των υπολογισμών στους υπάρχοντες επεξεργαστές λαμβάνοντας υπόψιν του την υπολογιστική ισχύ και το ενεργειακό αποτύπωμα κάθε επεξεργαστή, βελτιστοποιώντας κατά αυτόν τον τρόπο την χρήση της υπολογιστικής ισχύς και των μνημών του ετερογενούς συστήματος.

Η μεθοδολογία μας εισάγει μία αμελητέα επιβάρυνση στον χρόνο εκτέλεσης κατά 1.24% σε σχέση με την περίπτωση να γίνει η διαχείριση δεδομένων μόνο από τον επεξεργαστή. Στην συνέχεια, θα εισάγουμε βασικές έννοιες του πολυεδρικού μοντέλου στην Παρ. 4.2, θα περιγράψουμε την μεθοδολογία του πλαισίου μας στην Παρ. 4.3, και θα παρουσιάσουμε τα τελικά αποτελέσματα της μεθόδου μας.

4.2. Πολυεδρικό Μοντέλο

Το πολυεδρικό μοντέλο είναι μαθηματικό πλαίσιο που χρησιμοποιείται κυρίως για ανάλυση βρόγχων (loops) για βελτιστοποίηση της μεταγλώττισης (compilation) σε ένα πρόγραμμα. Η μέθοδος του πολύεδρου θεωρεί ότι κάθε επανάληψη του loop (loop iteration) μπορεί να αναπαρασταθεί από ένα σημείο μέσα σε μαθηματικά αντικείμενα που ονομάζονται πολύεδρα (ή πολύτοπα). Μετασχηματισμοί που εφαρμόζονται πάνω σε πολύεδρα μεταφράζονται σε μετασχηματισμούς του πηγαίου κώδικα του προγράμματος μας. Η πολυεδρική ανάλυση αποτελεί ένα πολύτιμο εργαλείο για βελτιστοποίηση κώδικα μέσω του compiler λόγω της ευχέρειας να αλλάζει την μορφή των loops.

Ένα N-πολύεδρο είναι ένα γεωμετρικό αντικείμενο με επίπεδες πλευρές στον N-διάστατο χώρο. Το πεδίο ορισμού D του πολυέδρου είναι η τομή ενός πεπερασμένου

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

συνόλου από κλειστά ημίσεια διαστήματα (half spaces). Αυτή η αναπαράσταση μπορεί να γραφεί και ως ένα σύστημα από εξισώσεις και ανισώσεις:

$$D: \{x \in Q^n | Ax = b, Cx \geq D\}$$

Η ανάλυση με την μέθοδο του πολυέδρου αναπαριστά τα loops καθώς και τις εντολές μέσα στα loops ως πολύεδρα. Χρησιμοποιείται ευρέως σε δημοφιλής compilers όπως ο LLVM και ο GCC. Μέσω της δημιουργίας πολυέδρων, ένας compiler μπορεί να εντοπίσει εξαρτήσεις μεταξύ εντολών (data dependencies), να δημιουργήσει βελτιστοποιημένους χρονοπρογραμματισμούς εντολών (instruction schedules) και να ανακαλύψει παραλληλισμό μεταξύ εντολών ή επαναλήψεων ενός loop.

Παράδειγμα Ανάλυσης Πολυέδρου. Θα δείξουμε ένα απλό παράδειγμα ανάλυσης χρησιμοποιώντας την μέθοδο του πολυέδρου και αναφερόμενοι στον κώδικα της Εικόνα 5.

```
for (i=2; i <= min(M, -1+N+2), i++) {
    S1(i);
}
```

Εικόνα 5. Απλός κώδικας για το παράδειγμά μας.

Η συνθήκη που ελέγχει τον τερματισμό του loop αντιστοιχεί στον περιορισμό:

$2 \leq i \leq \min(M, -1 + N + 2)$ ο οποίος μπορεί να γραφεί και ως:

$2 \leq i \leq M$, και $2 \leq i \leq N + 1$.

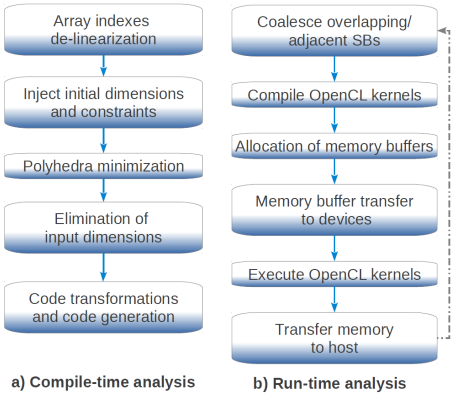
Ένα πολύεδρο μπορεί να αναπαρασταθεί από έναν πίνακα με *(1+Output+Input+Parameters+1)* στήλες και τόσες γραμμές όσος και ο αριθμός των περιορισμών που δημιουργούν το πολύεδρο. Η πρώτη στήλη δείχνει εάν η αντίστοιχη γραμμή περιγράφει ισότητα ή ανισότητα (τιμή 0 ή 1 , αντίστοιχα). Τα *Outputs* αντιστοιχούν σε δείκτες πινάκων, και στο συγκεκριμένο παράδειγμα δείχνουν ότι το εύρος τιμών της μεταβλητής *i*, που είναι το μοναδικό output είναι η ίδια η τιμή του *i*. Η τρίτη στήλη αντιστοιχεί στον μοναδικό iterator *i* του loop, ενώ οι επόμενες δύο στήλες αντιστοιχούν στις παραμέτρους. Η τελευταία στήλη αποθηκεύει το σταθερό κομμάτι των περιορισμών. Ο πίνακας που αντιπροσωπεύει το πολύεδρο του κώδικά μας είναι ο παρακάτω:

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & -2 \\ 1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

4.3. Πλαίσιο ανάλυσης διαχείρισης δεδομένων

Σε αυτήν την παράγραφο θα εξηγήσουμε την μεθοδολογία εύρεσης του μεγέθους της μνήμης που απαιτεί ένας συγκεκριμένος υπολογισμός και τον τρόπο με τον οποίο

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 6. Η ροή του υβριδικού αλγορίθμου μας

μπορούμε να αυτοματοποιήσουμε μεταφορές δεδομένων σε μία ετερογενή πλατφόρμα. Αυτή η τεχνική μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για την παραλληλοποίηση ενός αλγορίθμου πιθανώς σε τμήματα διαφορετικού βαθμού διακριτότητας (granularity) από ότι αρχικά έχει καθορίσει ο προγραμματιστής.

Η πρώτη φάση της πολυεδρικής ανάλυσης λαμβάνει χώρα κατά την διάρκεια του compilation. Στοχεύει στο να δημιουργήσει μια σειρά από παραμετρικές εξισώσεις που να υπολογίζουν το διάστημα των θέσεων μνήμης που μπορούν να προσπελασθούν από κάθε κομμάτι του κώδικα. Κατά την διάρκεια εκτέλεσης του κώδικα, η δεύτερη φάση διαχωρίζει αυτόματα τα δεδομένα και τα μεταφέρει με έναν βέλτιστο τρόπο μεταξύ των επεξεργαστικών στοιχείων. Η Εικόνα 6 δείχνει την ροή και των δύο φάσεων του αλγορίθμου μας.

Στατική φάση (compilation).

Η ανάπτυξη της στατικής φάσης έγινε με την βοήθεια εργαλείων όπως το Polyhedral Extraction Tool (PET) [7], το ISL [6] και το PolyLib [8]. Το PET παίρνει σαν είσοδο τον πηγαίο κώδικα και δημιουργεί το πολυεδρικό μοντέλο για τα loops του κώδικα αυτού. Η ISL είναι μία βιβλιοθήκη εργαλείων για καλύτερη αναπαράσταση πολυέδρων, ενώ η PolyLib είναι μία βιβλιοθήκη που παρέχει εργαλεία για την επεξεργασία πολυέδρων.

Το αποτέλεσμα της πρώτης φάσης του αλγόριθμού μας είναι ένα σύνολο παραμετροποιημένων (parameterized) διαστημάτων για κάθε πίνακα (array) που προσπελαύνεται μέσα στο loop. Κάθε τέτοιο διάστημα περιέχει επίσης πληροφορίες για τον τύπο της προσπέλασης (read/write). Τα στάδια της φάσης αυτής που φαίνονται και στην Εικόνα 6 είναι τα εξής:

1. Array index de-linearization. Η ανάλυση μας αφορά κάθε εντολή προγράμματος μέσα σε loops που προσπελαύνει μονοδιάστατους και δισδιάστατους πίνακες εφόσον οι προσπελάσεις είναι του τύπου *array[row*width+column]*. Λόγω της παρουσίας της παραμέτρου *width,* που αναπαριστά τον αριθμό των στηλών του πίνακα, το εργαλείο PET δεν μπορεί να ολοκληρώσει την ανάλυση επειδή θεωρεί ότι η αντίστοιχη προσπέλαση δεν είναι συσχετισμένη (affine). Αντιμετωπίζουμε αυτό το πρόβλημα με το να

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επεκτείνουμε το εργαλείο PET θεωρώντας τους δείκτες *row* και *column* σαν ανεξάρτητους δείκτες και το *width* σαν extra παράμετρο.

2. Inject initial dimensions and constraints. Ο κώδικας ενός παράλληλου πυρήνα (kernels) σε OpenCL ουσιαστικά περικλείεται από 6 loops, τα οποία αντιστοιχούν στην εκτέλεση ενός work-item της OpenCL μέσα σε ένα work-group (τα τρία εσωτερικά loops) και στην εκτέλεση ενός work-group μέσα σε ένα πλέγμα (grid) (τα τρία εξωτερικά loops). Σε αυτό το βήμα, εισάγουμε αυτά τα extra loops στο πολυεδρικό μας μοντέλο.

3. Polyhedral minimization. Ελαχιστοποίηση του μεγέθους του πολυέδρου μέσω της απαλοιφής περιορισμών που είναι πλεονάζοντες.

4. Elimination of input dimensions. Το επόμενο βήμα της στατικής φάσης είναι η μείωση της διάστασης των εισόδων (inputs) του πολυέδρου. Πολλές είσοδοι έχουν σταθερή τιμή κατά την διάρκεια της εκτέλεσης του κώδικα (πχ η παράμετρος *width*) και οι προσπελάσεις της μνήμης λόγω αυτών των εισόδων μπορούν να υπολογισθούν κατά την διάρκεια του compilation. Μετά το τέλος της φάσης αυτής, όλα τα πολύεδρα αποτελούνται από στήλες που αντιστοιχούν σε outputs και παραμέτρους.

5. Code transformations and generation. Ο τελικός στόχος αυτής της φάσης είναι να χωρίσουμε τον αρχικό υπολογισμό σε μικρότερα κομμάτια και να καθορίσουμε για κάθε κομμάτι επακριβώς τα δεδομένα εισόδου και εξόδου που απαιτούνται για να εκτελεσθεί το κομμάτι αυτό. Αυτό απαιτεί το να ξαναγράψει το εργαλείο σε αυτήν την φάση τον αρχικό πηγαίο μας κώδικα.

Ο κώδικας της Εικόνας 7 και της Εικόνας 8 δείχνουν τον κώδικα Monte Carlo για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDEs) πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου μας, αντίστοιχα. Με κόκκινο τονίζουμε τις αλλαγές όπου υπάρχουν.

Βασισμένος στην ανάλυση πολυέδρου, ο compiler δημιουργεί επίσης τον κώδικα για μία νέα συνάρτηση η οποία υπολογίζει τα διαστήματα της μνήμης που προσπελαύνονται από κάθε προσπέλαση μέσα στα κομμάτια του κώδικα που παράγονται σε αυτήν την φάση. Αυτή η συνάρτηση καλείται από το σύστημα χρόνου εκτέλεσης (RTS) όταν κληθεί ο αντίστοιχος παράλληλος πυρήνας (kernel) προς εκτέλεση.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
kernel void DoRandomWalks2D(
global float *D, global float *x, global float *result,
unsigned int num_walks, float btol, unsigned int nodes)
{
 private long me = get_local_id(0), us = get_local_size(0);
 private long __group_id_x = get_group_id(0);
 /* Some variable declarations and statements omitted */
 if ( __group_id_x < nodes ) {
  _x[0] = x[__group_id_x*2];
  _x[1] = x[__group_id_x*2+1];
  for ( i=0; i<num_walks; ++i ) {
    _x[0] = x[__group_id_x*2];
    _x[1] = x[__group_id_x*2+1];
    perform_random_walks(num_walks, _x, _D);
  }
  barrier(CLK_LOCAL_MEM_FENCE);
  if ( me == 0 ) {
    d = compose_d();
    result[__group_id_x] = d;
  }
}
```

Εικόνα 7. Ο αρχικός κώδικας OpenCL για την μέθοδο Monte Carlo (MC).

```
/* ocl_offsets: Holds the offset values (Dynamic mode) */
 kernel void DoRandomWalks2D( constant const int *ocl_offsets,
 global float *D, global float *x, global float *result,
 unsigned int num_walks, float btol, unsigned int nodes)
 {
 private long me = get_local_id(0), us = get_local_size(0);
 private long __group_id_x = get_global_id(0)/us;
 /* Some variable declarations and statements omitted */
 if ( __group_id_x < nodes ) {
   _x[0] = x[(__group_id_x-x0y)*x0w -x0o];
   _x[1] = x[(__group_id_x-x1y)*x1w +1 -x1o];
   for ( i=0; i<num_walks; ++i ) {
     _x[0] = x[(__group_id_x-x2y)*x2w -x2o];
     _x[1] = x[(__group_id_x-x3y)*x3w +1 -x3o];
     perform_random_walks(num_walks, _x, _D);
   }
    barrier(CLK_LOCAL_MEM_FENCE);
   if ( me == 0 ) {
    d = compose_d();
     result[__group_id_x -result2o] = d;
   }
 }
}
```

Εικόνα 8. Ο κώδικας OpenCL για την μέθοδο Monte Carlo μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου μας

Φάση χρόνου εκτέλεσης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Αυτή η φάση λαμβάνει χώρα κατά την εκτέλεση του κώδικα λίγο πριν το compilation του πυρήνα OpenCL που πρόκειται να εκτελεσθεί (σημ. στην OpenCL, οι πυρήνες είναι δυνατόν να γίνονται compile κατά την διάρκεια εκτέλεσης). Η συνάρτηση που παράγεται στο τέλος της προηγούμενης φάσης εκτελείται σε αυτήν την φάση με σκοπό να δημιουργήσει τις προσπελάσεις για κάθε συσκευή OpenCL. Τα στάδια της φάσης αυτής που φαίνονται και στην Εικόνα 6b είναι τα εξής:

1. Coalescing of overlapping/adjacent SBs. Επιμέρους περιοχές της μνήμης που προσπελαύνονται από κάθε κομμάτι του πυρήνα OpenCL συνενώνονται για να δημιουργήσουν μία μεγαλύτερη περιοχή με σκοπό να μειωθεί ο αριθμός των μεταφορών δεδομένων μεταξύ Host και των υπόλοιπων συσκευών (CPU ή GPU).
2. Allocation of memory buffers. Μετά την φάση της συνένωσης των επιμέρους τμημάτων μνήμης, γίνεται δυναμική δέσμευση ανάλογης ποσότητας μνήμης σε κάθε επεξεργαστικό στοιχείο (CPU ή GPU) που είναι στο σύστημα μας.
3. Memory buffer transfer to devices. Η μεταφορά δεδομένων μεταξύ του Host και των υπόλοιπων συσκευών γίνεται μόνο την πρώτη φορά ή όταν καινούργια δεδομένα έχουν δημιουργηθεί στις θέσεις μνήμης και θα πρέπει να μεταφερθούν και αυτά.

4.4. Αποτελέσματα της μεθόδου για PDEs

Χρήση Ο αλγόριθμος για υλοποίηση των elliptic PDE solvers είναι ένας εναλλακτικός τρόπος επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi-domain, multiphysics). Ο βασικός παράλληλος πυρήνας (kernel) του αλγορίθμου αυτού (Εικόνα 3) πραγματοποιεί τυχαίους περιπάτους (random walks) από το σύνορο (boundary) ενός υπόχωρου (sub-domain) στο σύνορο του μεγαλύτερου χώρου (domain). Ο σκοπός του περιπάτου είναι ο υπολογισμός των αρχικών συνθηκών του υπόχωρου για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων.

Μετά από ανάλυση και profiling της εφαρμογής μέσω της σουίτας Intel(TM) Vtune αναγνωρίσαμε δύο κρίσιμα σημεία της εφαρμογής, που καταναλώνουν σχεδόν πλήρως το χρόνο εκτέλεσης της εφαρμογής. Η πρώτη μέθοδος ονομάζεται ***monte_carlo*** και είναι η συνάρτηση υπεύθυνη για την παραγωγή τυχαίων μονοπατιών. Το αμέσως επόμενο πιο χρονοβόρο τμήμα της εφαρμογής είναι η επίλυση συστημάτων μέσω της μεθόδου ***conjugate gradient*** η οποία είναι υλοποιημένη στην βιβλιοθήκη *deal.II*. Αρχικά επιλέξαμε να επικεντρωθούμε στην συνάρτηση ***monte_carlo*** μιας και αυτή αποτελεί ουσιαστικά την ουσία της εφαρμογής.

Πριν παρουσιάσουμε τον λόγο επιτάχυνσης μέσω της χρήσης OpenCL Kernels βρίσκουμε σκόπιμο να αναφέρουμε τα χαρακτηριστικά που έχει η πλατφόρμα πάνω στην οποία εκτελέσαμε τις διαφορετικές εκδόσεις της εφαρμογής.

Για την πειραματική μελέτη απόδοσης χρησιμοποιήσαμε τα εξής δύο υπολογιστικά κυκλώματα:

- Επεξεργαστής γενικού σκοπού: *Intel(R) Core(TM) i7 CPU 870 (2.93GHz)*
- Κάρτα γραφικών: *GeForce GTX 480 (1401MHz)*

Για τα πειράματα που εκτελούνται στον Intel επεξεργαστή (αρχική έκδοση του κώδικα) χρησιμοποιούμε 8 νήματα ενώ για την εκτέλεση στην κάρτα γραφικών χρησιμοποιούμε N*768 νήματα όπου N ο αριθμός των σημείων στα οποία θα εφαρμοστεί η μέθοδος ***monte_carlo***. Επειδή η συνολική επιτάχυνση του προγράμματος διαμορφώνεται σε σχέση με το μέγεθος του προβλήματος που τίθεται για επίλυση παρουσιάζουμε μερικές ενδεικτικές εκτελέσεις στον παρακάτω πίνακα:

Χρόνος εκτέλεσης CPU (Διάσταση Χώρου)	**Χρόνος εκτέλεσης GPU / Χρονοβελτίωση**	**Μέσο σφάλμα CPU**	**Μέσο Σφάλμα GPU**
100 secs ***(2D)***	*34 secs /* ***2.94x***	*0.0002041409246*	*8.811696406e-05*
241 secs ***(3D)***	*35 secs /* ***6.89x***	*0.01288890583*	*0.01290900319*
761 secs ***(2D)***	*85 secs /* ***8.95x***	*0.0002024040681*	*2.788477219e-05*
2026 secs ***(3D)***	*2004 secs /* ***1x***	*0.009886439747*	*0.009778896185*

Επιλέξαμε τυχαία 4 παραδείγματα για να παρουσιάσουμε την βελτιστοποίηση στη μέθοδο μας. Το γεγονός ότι η GPU φαίνεται να παράγει ορθότερες εκτιμήσεις είναι τυχαίο, σε γενικές γραμμές οι εκτιμήσεις των δύο υλοποιήσεων έχουν παραπλήσιες τιμές. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η αυξομείωση της χρονοβελτίωσης, με αποκορύφωμα το τελευταίο από τα 4 παραδείγματα. Αν και δεν οδήγησε σε ουσιαστική διαφορά στο συνολικό χρόνο εκτέλεσης, η συνάρτηση που επιλέξαμε να επιταχύνουμε είχε χρονοβελτίωση ***10.67x*** όμως η διάρκεια εκτέλεσής της ήταν *32* και *3* δευτερόλεπτα σε επεξεργαστή και κάρτα γραφικών, αντίστοιχα. Αυτό είναι ένδειξη πως μπορούμε να λάβουμε περαιτέρω χρονοβελτίωση με την βελτιστοποίηση της συνάρτησης που επιλύει τα συστήματα που προκύπτουν (*μέθοδος conjugate gradient*) μετά τη διαδικασία εκτίμησης (***monte_carlo***).

Μέσο σφάλμα

Η επιταχυμένη υλοποίηση τείνει να παράγει καλύτερες προσεγγίσεις, δηλαδή με μικρότερο μέσο σφάλμα. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι τα βάρη των μονοπατιών αθροίζονται χρησιμοποιώντας 768 double precision floating point αριθμούς. Η αρχική υλοποίηση χρησιμοποιούσε 1 τέτοια μεταβλητή. Λόγω της φύσης των floating point αριθμών όταν προστίθενται μεταξύ τους αριθμοί εισάγεται ένα σφάλμα στο τελικό αποτέλεσμα, το οποίο μεγαλώνει όσο μεγαλώνει η απόσταση των αριθμών. Επειδή πλέον χρησιμοποιούνται πολλές μεταβλητές για την άθροιση των μονοπατιών είναι

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

λιγότερο πιθανό να προστεθούν αριθμοί πολύ διαφορετικοί σε σχέση με την πρώτη υλοποίηση που ήταν "απόλυτα σίγουρο" μιας και υπήρχε μόνο 1 μεταβλητή στην οποία γινόταν όλο το άθροισμα για ένα σημείο.

Μεθοδολογία

Οι αλλαγές που κάναμε έγιναν με τέτοιο τρόπο ώστε ο τρόπος υπολογισμού της μεθόδου ***monte_carlo*** να επιλέγεται κατά την εκτέλεση της εφαρμογής. Αυτό μας οδήγησε αρχικά στην αλλαγή του τρόπου δέσμευσης μνήμης για την αποθήκευση των δεδομένων εισόδου της συνάρτησης. Από μία λίστα με λίστες μεταβλητών double precision καταλήξαμε πάλι σε μία δισδιάστατη δομή της οποίας όμως τα στοιχεία είναι αποθηκευμένα σε διαδοχικές θέσεις μνήμης. Έτσι δεν χρειάστηκαν να γίνουν αλλαγές στον αρχικό κώδικα ενώ η μεταφορά δεδομένων προς την GPU έγινε στη συνέχεια με πολύ απλό τρόπο.

Το επόμενο βήμα ήταν να δημιουργηθεί μία απλή υλοποίηση του πυρήνα της ***monte_carlo***, δηλαδή ο υπολογισμός ενός μόνο μονοπατιού, σε γλώσσα C ώστε να μην έχουμε τα overheads της C++ και να μπορεί να γίνει απεσφαλμάτωση γρήγορα και εύκολα πριν καν γίνει η τελική υλοποίηση στην κάρτα γραφικών. Σε αυτό το σημείο εντοπίσαμε πως υπήρχε μια βοηθητική συνάρτηση η οποία καλείται πολλές φορές και έκανε χρήση τεσσάρων if-statements ώστε να υπολογίσει την ελάχιστη τιμή τεσσάρων παραστάσεων. Κάναμε μερικές αλλαγές στον κώδικα ώστε να μειώσουμε τους ελέγχους έχοντας ως σκοπό να καταλήξουμε σε γρηγορότερη εκτέλεση, δυστυχώς όμως η επιτάχυνση λόγω αυτής της βελτιστοποίησης ήταν μηδαμινή και στις δύο υπολογιστικές μονάδες.

Η OpenCL υλοποίηση χρησιμοποιεί πολλαπλά νήματα για τον υπολογισμό της τιμής σε ένα σημείο. Αυτό γίνεται αναθέτοντας σε καθένα από αυτά ένα κλάσμα του συνολικού αριθμού μονοπατιών που πρέπει να "περπατηθούν" ώστε να προκύψει η εκτιμώμενη τιμή του σημείου. Ενδεικτικά αναφέρουμε πως η τρέχουσα υλοποίηση όταν εκτελείται σε μία GeForce GTX 480 χρησιμοποιεί **768** τέτοια νήματα για τον υπολογισμό κάθε σημείου, όταν ο χώρος έχει 2 διαστάσεις.

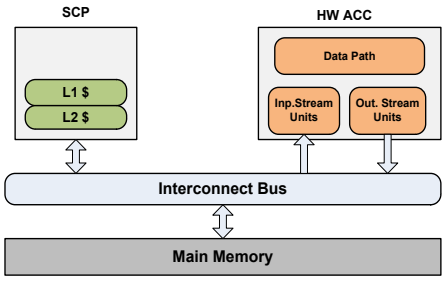
Αφού επιβεβαιώσαμε την ορθότητα του κώδικα εκτελώντας πολλαπλά πειράματα και έχοντας τις ίδιες τιμές που προκύπτουν από την αρχική υλοποίηση συνεχίσαμε με το σχεδιασμό του OpenCL Kernel. Αυτή τη φορά όμως λόγω αύξησης στον αριθμό των καταχωρητών που χρησιμοποιούνται από τον OpenCL Kernel για τα μονοπάτια σε 3D χώρο τα νήματα που χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση ενός σημείου μειώθηκαν στα **576**.

Τέλος και στους 2 kernels χρησιμοποιήσαμε τις native υλοποιήσεις των συναρτήσεων ***cos/log/sin*** σε σημεία που δεν επηρεάζουν την ακρίβεια της εκτίμησης, μιας και εφαρμόζονται σε δεδομένα τα οποία παράγονται με ψευδοτυχαίο τρόπο. Έτσι η μείωση της ακρίβειας που υπεισέρχεται λόγω των native υλοποιήσεων εμφανίζεται ουσιαστικά ως επιπλέον τυχαιότητα, μάλιστα παρατηρήσαμε ότι σε πολλές περιπτώσεις η ακρίβεια των εκτιμήσεων βελτιώνεται.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

5. Χρήση μοντέλου παράλληλου προγραμματισμού OpenCL για σύνθεση αρχιτεκτονικών (Silicon OpenCL)

Σε αυτήν την έκθεση θα περιγράψουμε το SOpenCL, ένα νέο εργαλείο και μεθοδολογία η οποία δημιουργεί επιταχυντές υλικού (hardware accelerators) που είναι τμήματα ενός ολόκληρου συστήματος (System On Chip, SoC), όπως φαίνεται και στην Εικόνα 9.



Εικόνα 9. Το τελικό μας σύστημα που περιλαμβάνει τον επιταχυντή υλικού (HW ACC) που παράγει η OpenCL και τον κύριο επεξεργαστή (Scalar Processor, SCP).

Η OpenCL είναι ένα βιομηχανικό standard για την δημιουργία παράλληλων προγραμμάτων με σκοπό την εκτέλεση σε ετερογενή συστήματα (heterogeneous systems) [9]. Απαλλάσσει τον προγραμματιστή από το να γράψει κώδικα για κάθε πιθανή ετερογενή πλατφόρμα και με το να ασχοληθεί με τεχνικές λεπτομέρειες χαμηλού επιπέδου (low level details) δίδοντάς του την ευκαιρία να εστιάσει στον ίδιο τον αλγόριθμο και στο πρόβλημα που καλείται να επιλύσει.

Υπάρχουν κάποιες σημαντικές τεχνικές δυσκολίες στον σχεδιασμό και την υλοποίηση του SOpenCL [13]. Η OpenCL χρησιμοποιεί παράλληλους πυρήνες (kernels) για να εκφράσει υπολογισμούς σε πολύ χαμηλό επίπεδο (granularity), που είναι το επίπεδο του work-item (ή thread όπως έχουμε δει στην CUDA). Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο γιατί φανερώνει τον παραλληλισμό της εφαρμογής στο χαμηλότερο επίπεδο και διευκολύνει την εκτέλεση του προγράμματος από CPU και GPU. Παρόλα αυτά, η δημιουργία επιταχυντών υλικού στο επίπεδο του work-item μπορεί να μην είναι ιδανική λύση λόγω του ότι κάθε τέτοιος επιταχυντής θα κάνει πολύ λίγη δουλειά κάθε φορά που καλείται.

Σαν πρώτη φάση, το εργαλείο SOpenCL περιέχει έναν μεταγλωττιστή source-to-source που μεταφράζει τον κώδικα OpenCL σε κώδικα C σε διαφορετικό όμως επίπεδο παραλληλισμού από τον κώδικα OpenCL. Στην συγκεκριμένη περίπτωση ο μεταγλωττιστής μετατρέπει τον κώδικα σε επίπεδο work-group (ή block), έτσι ώστε κάθε κλήση του επιταχυντή να εκτελεί εργασία που να αντιστοιχεί σε ένα work-group.

Η δεύτερη φάση του SOpenCL μετατρέπει τον C κώδικα σε έναν επιταχυντή υλικού σε synthesizable Verilog. Ο επιταχυντής ακολουθεί ένα συγκεκριμένο πρότυπο αρχιτεκτονικής (architectural template) το οποίο παίρνει συγκεκριμένη

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

μορφή ανάλογα με τις απαιτήσεις απόδοσης του χρήστη και την συγκεκριμένη εφαρμογή που υλοποιείται στην FPGA. Η δεύτερη φάση του SOpenCL αποτελείται από μία σειρά από βελτιστοποιήσεις του compiler όπως predication, code slicing και modulo scheduling που εφαρμόζονται διαδοχικά στον κώδικα C. Στο τελικό στάδιο το εργαλείο SOpenCL δημιουργεί synthesizable Verilog.

5.1. Πρώτη φάση του SOpenCL

Για να επιτύχουμε την αποδοτική εκτέλεση παράλληλων πυρήνων OpenCL, εφαρμόζουμε μια αλληλουχία από μετατροπές source to source για να ανεβάσουμε το επίπεδο του πυρήνα από το work-item στο work-group. Μετά τις μετατροπές αυτές στον πηγαίο κώδικα, ο νέος παράλληλος πυρήνας εκφράζει τον υπολογισμό που εκτελεί το work-group.

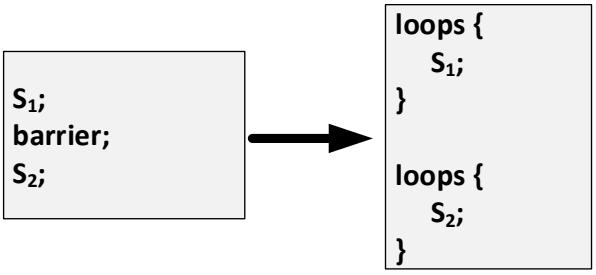
Η πρώτη φάση του SOpenCL αποτελείται από δύο βήματα:

1. Σειριοποίηση των λογικών νημάτων (Logical Thread Serialization). Αυτό το βήμα περικλείει τον κώδικα του πυρήνα με ένα τριπλό loop και με αυτόν τον τρόπο μετατρέπει τον υπολογισμό ενός work-item σε υπολογισμό ενός work-group.
2. Απαλοιφή εντολών συγχρονισμού (barriers). Η OpenCL δίνει την δυνατότητα στον προγραμματιστή να συγχρονίσει την εκτέλεση των work-items που εκτελούν έναν κώδικα OpenCL μέσω των εντολών barrier. Μία εντολή barrier αναγκάζει όλα τα work-items ενός work-group να εκτελέσουν την εντολή αυτή πριν μπορέσει οποιοδήποτε work-item να συνεχίσει με την εκτέλεση των εντολών μετά την barrier. Αντίστοιχα, η εντολή barrier μέσα σε ένα loop αναγκάζει όλα τα work-items να περιμένουν στην εντολή αυτή πριν μπορέσουν να συνεχίσουν με την επόμενη επανάληψη του loop.

   Για να εξασφαλίσουμε σωστή λειτουργικότητα κατά την μετατροπή του κώδικα από OpenCL σε C σε περίπτωση που υπάρχουν εντολές barrier, χωρίζουμε τον κώδικα σε δύο μπλόκς, ένα πριν την barrier και ένα μετά έτσι ώστε αυτά τα μπλόκς να μην περιέχουν την εντολή barrier. Μετά εφαρμόζουμε την τεχνική loop fission για να χωρίσουμε το αρχικό τριπλό loop σε δύο επιμέρους τριπλά loops για να εξασφαλίσουμε την σωστή μετατροπή του κώδικα σε C (Εικόνα 10).

Περισσότερες λεπτομέρειες για τον μετατροπές που εφαρμόζει ο compiler υπάρχουν στο [13].

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



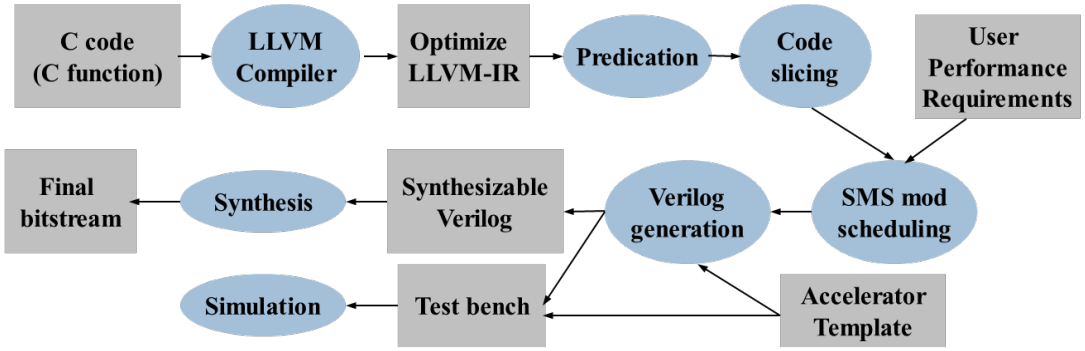
Εικόνα 10. Απαλοιφή εντολών barriers με την χρήση loop fission.

5.2. Δεύτερη φάση του SOpenCL

Μετά την πρώτη φάση, το SOpenCL μεταφράζει τον κώδικα σε Verilog σύμφωνα με την σειρά των βημάτων που φαίνονται στην Εικόνα 11. Ο αλγόριθμος αυτός χρησιμοποιεί και επεκτείνει τον LLVM compiler [11]. Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του SOpenCL είναι ότι χρησιμοποιεί ένα καλά σχεδιασμένο αρχιτεκτονικό πρότυπο (template) για να δημιουργήσει υλικό όπως φαίνεται στην Εικόνα 12.

Πρότυπο αρχιτεκτονικής

Η μονάδα δεδομένων της Εικόνα 12 αποτελείται από ένα δίκτυο από λειτουργικές μονάδες (Functional Units, FUs) που αναλαμβάνουν το κυρίως έργο της επεξεργασίας δεδομένων. Οι μονάδες αυτές λαμβάνουν δεδομένα από τις μονάδες Εισόδου/Εξόδου Ροής σε μορφή FIFO και παράγουν τα δεδομένα εξόδου πάλι σε μορφή FIFO. Η διασύνδεση μεταξύ των λειτουργικών μονάδων γίνεται μέσω κυκλωμάτων ουρών FIFO που αποτελούνται από πολυπλέκτες και buffers για να κατευθύνουν δεδομένα από τις μονάδες που παράγουν στις μονάδες που καταναλώνουν ενδιάμεσα αποτελέσματα.

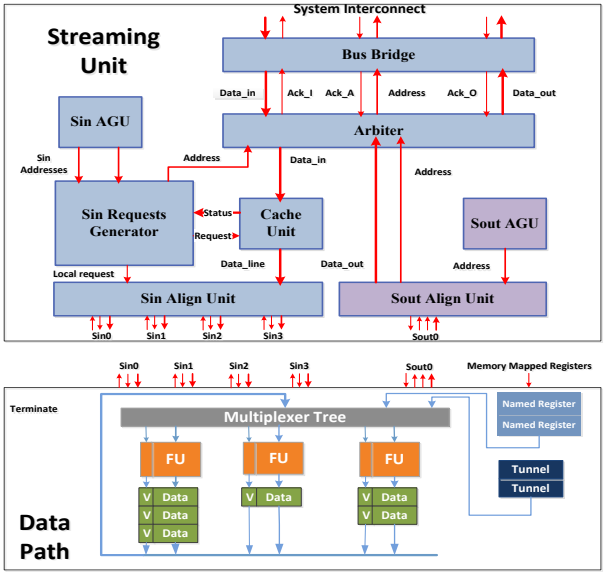


Εικόνα 11. Ο αλγόριθμος δημιουργίας επιταχυντή υλικού από κώδικα C.

Το SOpenCL διαμορφώνει τον τελικό επιταχυντή υλικού μεταβάλλοντας τον τύπο του μίγματος των FUs (δηλ. πόσους multipliers, adders, shifters, κοκ), την συγκεκριμένη λειτουργία που επιτελούν, την διασύνδεση μεταξύ των FUs καθώς και το bandwidth μεταξύ της μονάδας δεδομένων και της μονάδας Εισόδου/Εξόδου.

Η μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής αναλαμβάνει όλες τις αρμοδιότητες που έχουν να κάνουν με την μεταφορά δεδομένων μεταξύ της κύριας μνήμης και του επιταχυντή.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 12. Το πρότυπο αρχιτεκτονικής που χρησιμοποιούμε περιλαμβάνει την μονάδα Δεδομένων (Data Path) και την μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής (Streaming Unit)

Αυτές οι αρμοδιότητες είναι η δημιουργία των διευθύνσεων μνήμης, ευθυγράμμιση και ταξινόμηση δεδομένων από και προς τον επιταχυντή καθώς και προσαρμογή μεταξύ του επιταχυντή και του διαύλου του συστήματος (system bus). Η μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής αποτελείται από μία ή περισσότερες μονάδες Εισόδου και Εξόδου. Όπως και για την μονάδα Δεδομένων, έτσι και εδώ το SOpenCL συνθέτει το κύκλωμα έτσι ώστε να ταιριάζει στα χαρακτηριστικά της εφαρμογής και στις απαιτήσεις του υπόλοιπου συστήματος.

Ροή του αλγορίθμου SOpenCL

Αναφερόμενος στην Εικόνα 11, βλέπουμε ότι το εργαλείο SOpenCL ακολουθεί μια σειρά από βήματα στον μεταγλωττιστή LLVM για να παράγει το τελικό κύκλωμα του επιταχυντή σε Verilog. Εν συντομία, τα πιο σημαντικά βήματα είναι τα εξής:

a) Compiler optimizations and Predication. Το πρώτο βήμα είναι να μετατρέψουμε τον κώδικα C σε εσωτερική μορφή του LLVM. Ο ίδιος ο LLVM εφαρμόζει μια σειρά από στάνταρντ βελτιστοποιήσεις του κώδικα όπως constant propagation, dead code elimination, strength reduction, κοκ. Το predication είναι μία τεχνική του μεταγλωττιστή η οποία μετατρέπει εξαρτήσεις ελέγχου (control dependencies) σε εξαρτήσεις δεδομένων (data dependencies). Το predication εξαλείφει όλες τις εντολές διακλάδωσης (branches) στον κώδικα C με την χρήση επιπλέον μεταβλητών του 1-bit οι οποίες ονομάζονται Boolean guards. Ο βασικός σκοπός του predication είναι η εξάλειψη όλων των διακλαδώσεων που προέρχονται από εντολές if-then-else, και η προετοιμασία του κώδικα για την επόμενη φάση του modulo scheduling.

b) Code slicing. Ο κώδικας C μετά το πρώτο βήμα εμπεριέχει εντολές Εισόδου/Εξόδου δηλ. εντολές φορτώματος και αποθήκευσης στην μνήμη καθώς και εντολές υπολογισμού. Το βήμα του code slicing διαχωρίζει τον

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

κώδικα σε 3 κομμάτια: (i) το κομμάτι κώδικα που κάνει μόνο υπολογισμούς, (ii) το κομμάτι κώδικα που περιέχει όλες τις εντολές φορτώματος (load) από την μνήμη και τις εντολές υπολογισμού της διεύθυνσης φορτώματος, και (iii) το κομμάτι κώδικα που περιέχει όλες τις εντολές αποθήκευσης (store) από την μνήμη και τις εντολές υπολογισμού της διεύθυνσης αποθήκευσης.

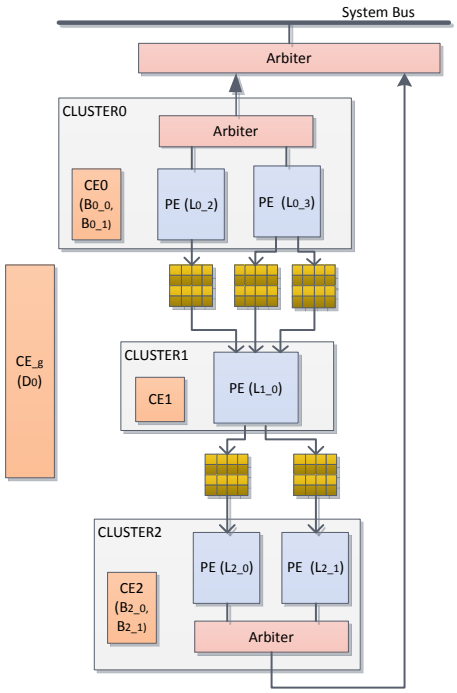
Ο λόγος που εκτελούμε αυτό το βήμα είναι επειδή κάθε ένα από τα 3 κομμάτια του κώδικα αντιστοιχεί και σε διαφορετικό κομμάτι της αρχιτεκτονικής: το υπολογιστικό κομμάτι αντιστοιχεί στην μονάδα επεξεργασίας δεδομένων, ενώ τα κομμάτια για load και store αντιστοιχούν στην μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής. Με το να ξεχωρίσουμε τον κώδικα σε 3 διακριτά μέρη, μπορούμε να διαμορφώσουμε κάθε ένα τμήμα του επιταχυντή ανεξάρτητα χρησιμοποιώντας πληροφορία από το αντίστοιχο τμήμα του κώδικα.

c) Swing Modulo Scheduling (SMS). Η τεχνική SMS είναι μια τεχνική χρονοπρογραμματισμού εντολών (instruction scheduling) η οποία εκμεταλλεύεται τον παραλληλισμό μεταξύ εντολών που ανήκουν σε διαφορετικές επαναλήψεις ενός loop και τις προγραμματίζει να εκτελεσθούν παράλληλα [SMS]. Ο αλγόριθμος SMS χρησιμοποιεί ευριστικές μεθόδους για να ελαχιστοποιήσει το Iteration Interval (II), που είναι το σταθερό διάστημα αριθμού κύκλων μηχανής στο οποίο ξεκινάμε διαδοχικές επαναλήψεις του loop. Το SMS εφαρμόζεται σε κάθε loop και χωριστά σε κάθε ένα από τα τρία τμήματα του κώδικα όπως αυτά έχουν παραχθεί από το code slicing.

d) Δημιουργία υλικού. Το τελικό βήμα της δεύτερης φάσης του SOpenCL είναι η δημιουργία του επιταχυντή υλικού σε Verilog χρησιμοποιώντας την έξοδο που δημιουργεί το SMS και το αρχιτεκτονικό πρότυπο που περιεγράφηκε προηγουμένως. Εκτός από το υλικό του επιταχυντή, το SOpenCL δημιουργεί ακόμα και ένα αρχείο ελέγχου (testbench) το οποίο χρησιμοποιείται για την αυτοματοποίηση της διαδικασίας ελέγχου του παραχθέντος κυκλώματος.

Η Εικόνα 5 δείχνει το διάγραμμα του επιταχυντή που υλοποιεί τον αλγόριθμο για LU Decomposition. Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος αποτελείται από πολλαπλά loops τα οποία δημιουργούν και παραπάνω του ενός επιταχυντές.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 13. Το αρχιτεκτονικό διάγραμμα ενός επιταχυντή που υλοποιεί τμήμα ενός αλγορίθμου LU Decomposition.

5.3. Instruction clustering

Μία επιπλέον βελτιστοποίηση του SOpenCL είναι η ομαδοποίηση (clustering) εντολών για την δημιουργία Macro Functional Units (MFUs), δηλ. λειτουργικών μονάδες που συνδυάζουν παραπάνω από μια απλούστερες λειτουργικότητες [6]. Ο λόγος που δημιουργούμε τέτοια MFUs είναι για να μειώσουμε τον αριθμό των διασυνδέσεων μεταξύ μικρών λειτουργικών μονάδων. Με άλλα λόγια, θέλουμε να μειώσουμε την επιβάρυνση των διασυνδέσεων σε σχέση με τις λειτουργικές μονάδες. Είναι γνωστό μάλιστα ότι τις περισσότερες φορές, ή έλλειψη επαρκούς αριθμού καναλιών διασύνδεσης είναι και ο κυριότερος λόγος για το ότι ένα κύκλωμα δεν μπορεί να υλοποιηθεί σε μια FPGA.

Χρησιμοποιούμε μία μέθοδο που βασίζεται σε grammar-induction τεχνικές για να ομαδοποιήσουμε βασικές εντολές σε μακρο-εντολές (macroinstructions) οι οποίες με την σειρά τους υλοποιούνται σαν MFUs με μικρότερες απαιτήσεις σε πολυπλοκότητα διασυνδέσεων.

Η Εικόνα 14 δείχνει ένα παράδειγμα για το πώς δύο διαδοχικές προσθέσεις (μέσα στα κόκκινα κουτιά) μπορούν να συγχωνευθούν για εκτέλεση σε ένα MFU αντί να εκτελεσθούν σε ένα FU που κάνει πρόσθεση. Η βασική ιδέα είναι ότι μία μεγαλύτερη λειτουργική μονάδα μειώνει την ανάγκη για πολλές διασυνδέσεις μεταξύ μικρότερων μονάδων και συνεπώς αυξάνει την πιθανότητα να έχουμε ένα κύκλωμα το οποίο να μπορεί να πραγματοποιηθεί σε μία FPGA.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Εικόνα 14. Χρονοδρομολόγηση εντολών σε ένα Data Flow Graph (DFG) με a) βασικές και απλές εντολές και b) με μακροεντολές. Η μακροεντολή K υλοποιείται με το MFU K που είναι ένας 3-bit προσθετής με αρχιτεκτονική διοχέτευσης (pipelined).

5.1. Αποτελέσματα του SOpenCL στα μετροπρογράμματα OpenDwarfs

Το εργαλείο SOpenCL χρησιμοποιήθηκε για την υλοποίηση επιταχυντών υλικού για εφαρμογές που ανήκουν στα Dwarfs. Τα 13 Dwarfs είναι σύνολα εφαρμογών που κάθε ένα από αυτά τα σύνολα μπορούν να χαρακτηρισθούν από ένα κοινό πρότυπο (pattern) υπολογισμών και επικοινωνίας. Για παράδειγμα, ένα από τα 13 Dwarfs είναι το Dense Linear Algebra το οποίο περιλαμβάνει αλγορίθμους που επεξεργάζονται πυκνούς πίνακες (dense arrays). Ένας τέτοιος αλγόριθμος που έχουμε χρησιμοποιήσει για να αναπτύξουμε επιταχυντές υλικού είναι ο LU Decomposition [14]. Για να είμαστε πιο ακριβείς, χρησιμοποιούμε ένα σύνολο από μετροπρογράμματα, τα OpenDwarfs, που είναι open-source υλοποιήσεις σε OpenCL των Dwarfs.

Χωρίς να μπούμε σε λεπτομέρειες σχετικά με την υλοποίηση των OpenDwarfs με την χρήση του SOpenCL, τα αποτελέσματα δείχνουν ότι οι FPGAs είναι ανταγωνιστικές με τις GPUs όσον αφορά την ταχύτητα εκτέλεσης τέτοιων αλγορίθμων. Εάν λάβουμε υπόψιν μας και την κατανάλωση ενέργειας, στις οποίες οι FPGA υπερτερούν εμφανώς των GPUs, μπορούμε να βγάλουμε το συμπέρασμα ότι η χρήση εργαλείων σαν το SOpenCL έχουν την δυνατότητα να κάνουν τις FPGA πολύ ελκυστικές για την υλοποίηση παρόμοιων εφαρμογών. Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το SOpenCL και τις FPGAs μπορείτε να βρείτε στο [14].

6. Υλοποίηση PDEs με τεχνικές Monte Carlo σε τεχνολογία FPGA

Οι πρόσφατες εξελίξεις στην τεχνολογία των FPGA και στις μεθοδολογίες σύνθεσης υψηλού επιπέδου (High Level Synthesis - HLS) έχουν θέσει τα επαναδιατασσόμενη συστήματα στο δρόμο προς την επιστήμη ετερογενών συστημάτων υψηλών επιδόσεων (High Performance Computing - HPC). Οι FPGA επιταχυντές προσφέρουν καλύτερα χαρακτηριστικά στις επιδόσεις, στην ενέργεια και στο κόστος από ότι μία ομογενή CPU πλατφόρμα και είναι πιο αποδοτικοί ενεργειακά από ότι μια GPU πλατφόρμα.

Ωστόσο, το μεγαλύτερο εμπόδιο στην υιοθέτηση της FPGA τεχνολογίας σε HPC πλατφόρμες είναι το ότι ο προγραμματισμός των FPGA απαιτεί βαθιά γνώση χαμηλού επιπέδου σχεδίασης υλικού και μακρόχρονους στάδια ανάπτυξης. Αυτά τα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

χαρακτηριστικά καθιστούν τις γλώσσες περιγραφής υλικού (Hardware Description Languages - HDLs) μία ακατάλληλη τεχνολογία για την δημιουργία HPC εφαρμογών στις FPGA.

Αντιθέτως, εργαλεία HLS επιτρέπουν στους σχεδιαστές να χρησιμοποιήσουν υψηλού επιπέδου γλώσσες προγραμματισμού και προγραμματιστικά μοντέλα όπως οι C/C++ και OpenCL [2][4]. Ανεβάζοντας τη διαδικασία σχεδίασης υλικού στο επίπεδο ανάπτυξης λογισμικού, η HLS επιτρέπει όχι μόνο την γρήγορη πρωτοτυπία, αλλά και την εξερεύνηση αρχιτεκτονικών. Η πλειοψηφία των εργαλείων HLS προσφέρει ένα σύνολο οδηγιών βελτιστοποίησης που στοχεύουν στην ενημέρωση του μηχανισμού HLS σύνθεσης για την επιθυμητή βελτιστοποίηση κομματιών του πηγαίου κώδικα. Ο μηχανισμός σύνθεσης δημιουργεί επιταχυντές υλικού στοχεύοντας στις επιδόσεις ή στην ελαχιστοποίηση του χώρου που καταλαμβάνει η σχεδίαση, λαμβάνοντας υπόψη τις παραπάνω οδηγίες.

Αυτή η προσέγγιση δεν εκμεταλλεύεται στο έπακρο τις δυνατότητες των μοντέρνων FPGA να ενσωματώνουν αρχιτεκτονικές που μπορεί να περιέχουν πολλαπλούς επιταχυντές υλικού, ιεραρχίες μνήμης, δομές διαύλων επικοινωνίας και διεπαφές. Αυτό που είναι πραγματικά απαραίτητο, είναι μία μεθοδολογία για τον αυτόματο εντοπισμό και αξιολόγηση αρχιτεκτονικών πολλαπλών επιταχυντών, που υλοποιούν σύνθετες εφαρμογές λογισμικού. Η πολυπλοκότητα μίας τέτοιας μεθοδολογίας έγκειται στο γεγονός ότι οι επαναδιατασσόμενες πλατφόρμες προσφέρουν πολλαπλούς βαθμούς σχεδιαστικής ελευθερίας και ενδεχομένως ένα τεράστιο αριθμό pareto-βέλτιστων υλοποιήσεων.

Στην εργασία αυτή εισάγουμε μία συστηματική αρχιτεκτονική αξιολόγηση της τοποθέτησης εφαρμογών σε FPGAs υψηλών επιδόσεων που λειτουργούν ως επιταχυντές σε ένα περιβάλλον Linux. Ο στόχος είναι να αξιοποιηθούν όλα τα ενδιαφέροντα, επιπέδου συστήματος, αρχιτεκτονικά σενάρια, ώστε να χτιστεί ένας μηχανισμός που θα μπορεί να επιλέξει αυτόματα την καταλληλότερη αρχιτεκτονική για κάθε εφαρμογή. Βασιζόμενοι σε πειραματικές αναλύσεις, θέλουμε να λάβουμε γνώση για τις βέλτιστη αντιστοίχιση εφαρμογών – αρχιτεκτονικών, ώστε αργότερα να αυτοματοποιήσουμε αυτή τη διαδικασία. Συνεπώς, συγκρίνουμε τις επιδόσεις όλων των δυνατών λύσεων σε hardware με την επίδοση ενός software κώδικα που εκτελείται σε CPU υψηλών επιδόσεων (τη μονάδα υποδοχής – Host Unit).

Ποικίλες ερευνητικές προσπάθειες μελέτησαν το πρόβλημα δημιουργίας μίας Host-FPGA διεπαφής και on-chip καναλιών επικοινωνίας. Ο Vipin et al [14], ανέπτυξε ένα πλαίσιο λειτουργίας για την χρήση PCIe επικοινωνίας μεταξύ CPU υποδοχής και FPGA. Επίσης, χρησιμοποίησε πρότυπες HLS διεπαφές διαύλου για τις on-chip επικοινωνίες. Ωστόσο, παρέλειψε την παραμετροποίηση της λειτουργίας των διαύλων, καθώς και τις διαφορετικές ιεραρχίες μνήμης. Άλλες πρόσφατες έρευνες εξέτασαν την δημιουργία καναλιών ανεπηρέαστων από την καθυστέρηση δεδομένων [15], και μνημών κοινών μεταξύ πολλαπλών FPGA επιταχυντών. Σε αυτή την έρευνα επιδιώκουμε βαθύτερα επίπεδα παραμετροποίησης του συστήματος.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
blur_hor:
for (i = 0; i < Height; i++)
 for (j = 0; j < Width; j++)
 tmp(i,j)=(inp(i,j-1)+inp(i,j)+inp(i,j+1)/3

blur_ver:
for (i = 0; i < Height; i++)
 for (j = 0; j < Width; j++)
 out(i,j)=(tmp(i-1,j)+tmp(i,j)+tmp(i+1,j)/3
```

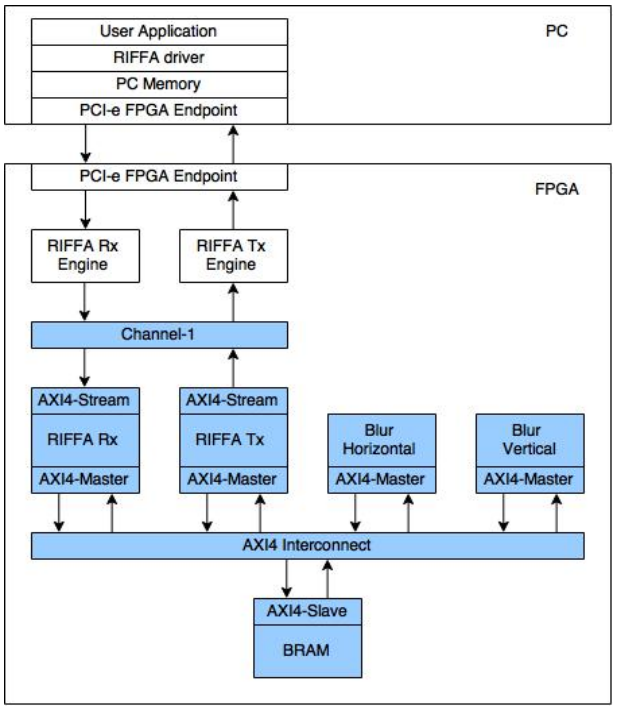
Εικόνα 15. Ο κώδικας για το οριζόντιο και το κάθετο φίλτρο Blur.

6.1. Εξερεύνηση του Χώρου Λύσεων της Σχεδίασης

Η καταχώριση 1 δείχνει τον ψευδοκώδικα του Blur φίλτρου, μία από τις εφαρμογές υπό εξέταση. Ο αλγόριθμος πρώτα εφαρμόζει ένα οριζόντιο και μετά ένα κάθετο 3-όρων βαθυπερατό φίλτρο μίας εικόνας εισόδου, αποθηκεύοντας προσωρινά το αποτέλεσμα του οριζόντιου φίλτρου στη μνήμη. Αυτός ο ψευδοκώδικας είναι βέλτιστος για μία CPU εκτέλεση, όχι για ένα σχεδιασμό στο υλικό, κάτι που επιφέρει μειονεκτήματα όταν επεξεργάζεται από HLS εργαλεία. Αυτός ο κώδικας καταλήγει σε δύο ξεχωριστούς hardware επιταχυντές, που πρέπει να επικοινωνούν μέσω μίας μεγάλης μνήμης που υλοποιείται είτε ως εξωτερική DRAM είτε ως πάνω στο chip BRAM (αν υπάρχει αρκετή BRAM στην FPGA). Με σκοπό να ενσωματωθούν οι FPGAs ως μέρος των μοντέρνων ετερογενών συστημάτων, εκμεταλλευτήκαμε τους τυποποιημένους αφαιρετικούς τρόπους επικοινωνίας που παρέχονται από υψηλού επιπέδου εργαλεία σύνθεσης όπως το Vivado HLS, ώστε να δημιουργήσουμε το προσαρμοζόμενο σύστημά μας.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η λογική της Εικόνα 15



παράγεται από το εργαλείο Vivado HLS, με βάση τις οδηγίες του προγραμματιστή του συστήματος. Δύο επιταχυντές υλοποιούνται και συνδέονται με την BRAM μνήμη μέσω μιας AXI4-master διασύνδεσης. Η αρχική αρχιτεκτονική επεκτείνεται εξερευνώντας αυτόματα τον αριθμό και τον τύπο των διαφόρων στοιχείων. Τέτοια στοιχεία αποτελούν οι επιταχυντές από άποψη απόδοσης, μεγέθους, καθυστέρησης και αριθμού. Επίσης, περιλαμβάνονται οι δομές και ο αριθμός των διαύλων επικοινωνίας, ο αριθμός και ο τύπος των μνημών, καθώς και η διεπαφή με τη μονάδα υποδοχής.

Επιπροσθέτως του προσαρμοζόμενου μέρους της αρχιτεκτονικής, έξτρα στοιχεία επικοινωνίας με τη μονάδα υποδοχής είναι απαραίτητα. Προς διευκόλυνση μας χρησιμοποιούμε ένα πλαίσιο επικοινωνίας ανοιχτού κώδικα, το RIFFA, που προσφέρει αφαιρετικά τη δυνατότητα στους προγραμματιστές λογισμικού να έχουν πρόσβαση στην FPGA ως μία μονάδα επιτάχυνσης συνδεδεμένη στο PCIe [20].

Το RIFFA υλοποιεί στο υλικό το πρωτόκολλο του PCIe άκρου, ώστε ο χρήστης να μην χρειάζεται να ασχοληθεί με τις λεπτομέρειες επικοινωνίας του επιταχυντή. Από την μεριά του τελευταίου συγκεκριμένα, το RIFFA προσφέρει ένα σύνολο καναλιών επικοινωνίας συνεχούς ροής που στέλνουν και λαμβάνουν δεδομένα μεταξύ της κύριας μνήμης της CPU και μίας προσαρμοσμένης FPGA λογικής. Στη μονάδα υποδοχής, η αρχιτεκτονική του RIFFA 2.0 είναι συνδυασμός ενός πυρήνα οδήγησης συσκευής και ενός συνόλου γλωσσικών δεσμεύσεων. Το RIFFA παρέχει στο χρήστη μία απλοϊκή διεπαφή προγραμματισμού εφαρμογών (API), που του επιτρέπει ξεχωριστά την πρόσβαση στα κανάλια για την μεταφορά δεδομένων στη λογική του επιταχυντή.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Εικόνα 16. Βασική αρχιτεκτονική πλατφόρμα για πειραματική αξιολόγηση. Η σκιαγραφημένη περιοχή δείχνει την παραμετροποιήσιμη λογική.

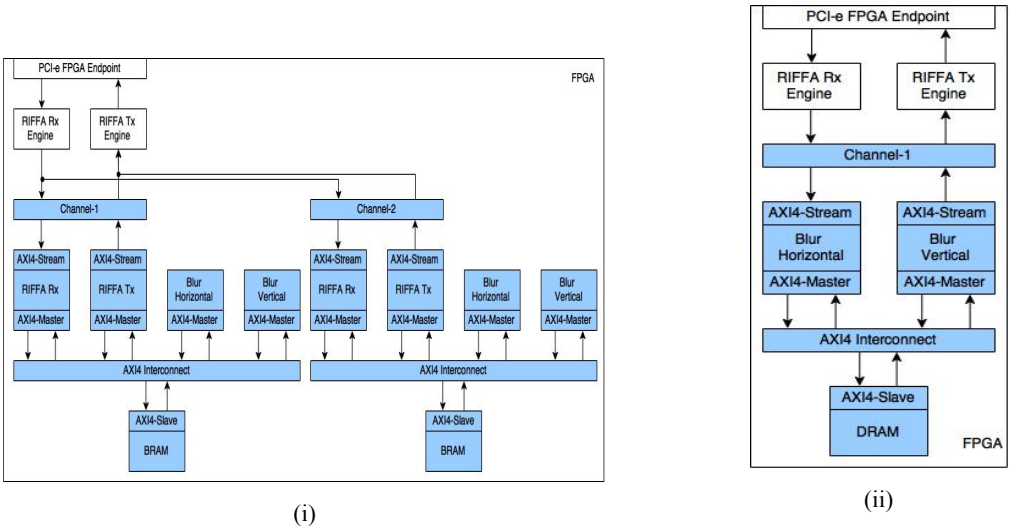
Στην Εικόνα 17 παρουσιάζονται δύο ενδεικτικά αρχιτεκτονικά σενάρια, που επεκτείνουν την αρχιτεκτονική αναφορά της Εικόνα 16. Μπορούμε αποτελεσματικά να διπλασιάσουμε την προσαρμόσιμη λογική χρησιμοποιώντας ένα επιπλέον RIFFA κανάλι επικοινωνίας (Εικόνα 17i). Ακόμα καλύτερα, η φύση της Blur εφαρμογής ως ένα συνεχής ροής μονοπάτι δεδομένων από σημείο σε σημείο, μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε το πρωτόκολλο AXI4-Stream για να μεταδώσουμε τα δεδομένα μεταξύ παραγωγού και καταναλωτή (Εικόνα 17ii). Κάποιες υλοποιήσεις μπορεί να κάνουν χρήση εξωτερικής DDR3 μνήμης (περιλαμβάνοντας έναν FPGA DDR3 ελεγκτή μνήμης), ώστε να μπορούν να φιλοξενήσουν μεγαλύτερες εικόνες με κόστος την αύξηση καθυστέρησης και χειρότερες επιδόσεις. Για να περιηγηθούμε έξυπνα στον απέραντο χώρο όλων των δυνατών σχεδιαστικών λύσεων, επινοήσαμε ένα σύνολο ευριστικών κανόνων για τη λήψη αποφάσεων:

1. Διατήρησε τα δεδομένα τοπικά και όσο το δυνατόν πιο κοντά στον επιταχυντή. Ο στόχος εδώ είναι να ελαχιστοποιηθεί η καθυστέρηση των αναγνώσεων/εγγραφών μεταξύ επιταχυντή και μνήμης δεδομένων.
2. Ελαχιστοποίησε τους κοινούς πόρους μεταξύ ανεξάρτητων επιταχυντών. Αυτή η οδηγία βοηθά στην εξάλειψη των συγκρούσεων ανάμεσα σε πολλαπλούς επιταχυντές κατά την απόκτηση πρόσβασης σε κανάλια επικοινωνίας ή θύρες προσπέλασης μνήμης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3. Επικάλυψε τις μεταφορές δεδομένων με το χρόνο λειτουργίας των επιταχυντών. Ο στόχος εδώ είναι να ελαχιστοποιηθεί ο χρόνος αναμονής για τη διαθεσιμότητα των δεδομένων στους επιταχυντές.

Η προσέγγιση του χώρου λύσεων της σχεδίασης ξεκινά από την βασική αρχιτεκτονική αναφοράς της Εικόνα 16. Στη συνέχεια, παίρνουμε σταδιακά κάποιες σχεδιαστικές επιλογές λαμβάνοντας υπόψη τους προαναφερθείς ευριστικούς κανόνες και αξιολογώντας την επίδραση των αποφάσεων στην επίδοση του συνολικού συστήματος.



Εικόνα 17. Δύο ενδιαφέροντα αρχιτεκτονικά σενάρια. (i) Διπλασιασμός της βασικής αρχιτεκτονικής χρησιμοποιώντας δύο RIFFA κανάλια. (ii) Χρήση AXI streaming διεπαφής μεταξύ των RIFFA καναλιών, των δύο επιταχυντών και της DRAM.

6.2. Αριθμητικά αποτελέσματα - Πειράματα

6.2.1. Μεθοδολογία

Σε αυτό το τμήμα, θα παρουσιάσουμε την έρευνα μας πάνω στην αρχιτεκτονική εξερεύνηση δύο εφαρμογών που φαίνονται στον Πίνακα 1. Για κάθε εφαρμογή, έχουμε ορίσει ένα πλήθος αρχιτεκτονικών σεναρίων που εκτείνεται σε ποικίλα σημεία του χώρου «μέγεθος εναντίον επίδοση». Ο software κώδικας βελτιστοποιείται με τη χρήση HLS οδηγιών (π.χ. διοχέτευση) με ελάχιστες αλλαγές του. Χρησιμοποιούμε το εργαλείο *Vivado HLS 2014.4* για τις hardware υλοποιήσεις μας πάνω σε μία πλακέτα *VC707* evaluation board *(XC7VX485T* FPGA). Όλα τα αποτελέσματα καταγράφονται μετά τη διαδικασία τοποθέτησης και διασύνδεσης των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

θεμελιωδών στοιχείων του σχεδίου στην FPGA. Ο ίδιος κώδικας σε γλώσσα C εκτελείται σε έναν τετραπύρηνο επεξεργαστή *E5520 Intel Xeon* σε συχνότητα λειτουργίας *2.27 GHz* και όλα τα αποτελέσματα των επιδόσεων συγκρίνονται. Πέραν του Blur φίλτρου που περιγράψαμε παραπάνω, έχουμε αναλύσει και μία εφαρμογή Monte Carlo προσομοίωσης.

Πίνακας 1. Εφαρμογές που χρησιμοποιήθηκαν για εξερεύνηση του χώρου αρχιτεκτονικών λύσεων

App.	Description	Input Set
Monte Carlo	Monte Carlo simulations in a 2D space	120 Points, 5000 Walks per point
Blur	Blur 2D filter	4096×4096 image

Η μέθοδος Monte Carlo (MC) αναπτύχθηκε ως ένας εναλλακτικός τρόπος προσέγγισης πολυδιάστατων επιστημονικών προβλημάτων. Διασπά ένα μοναδικό πρόβλημα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (Partial Differential Equation - PDE) σε ένα σύνολο ενδιάμεσων προβλημάτων. Ο κύριος πυρήνας τις εφαρμογής εκτελεί τυχαίες διαδρομές από κάποια αρχικά σημεία ενός 2D πλέγματος, ώστε να εκτιμήσει τις οριακές περιπτώσεις των ενδιάμεσων προβλημάτων. Ο MC είναι ένας υπολογιστικά βαρύς αλγόριθμος με πολλές αριθμητικές πράξεις διπλής ακρίβειας και κλήσεις σε μαθηματικές βιβλιοθήκες για τους αριθμητικούς, τριγωνομετρικούς και λογαριθμικούς υπολογισμούς αριθμών κινητής υποδιαστολής (Floating Point - FP). Ωστόσο, έχει ελάχιστες απαιτήσεις επικοινωνίας.

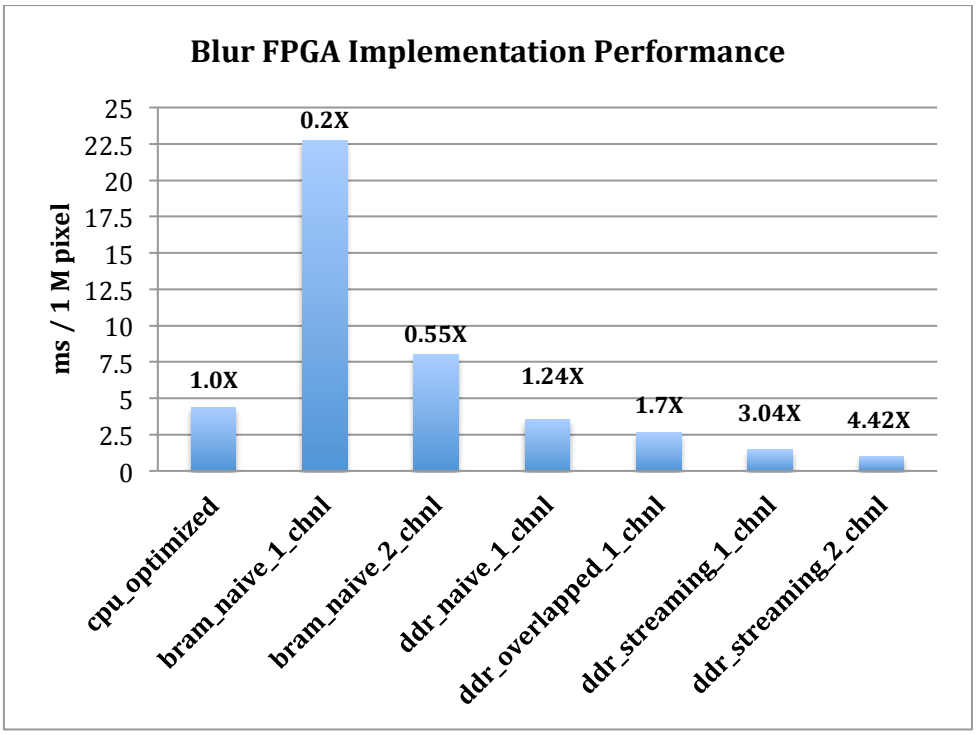
6.2.2. Αποτελέσματα

Η Εικόνα 18 παρουσιάζει τα αποτελέσματα επίδοσης των δύο περιπτώσεων υπό εξέταση σε διάφορα σενάρια υλοποίησης. Ο Πίνακας 2 δείχνει τις απαιτήσεις σε χώρο στην FPGA της κάθε πλατφόρμας.

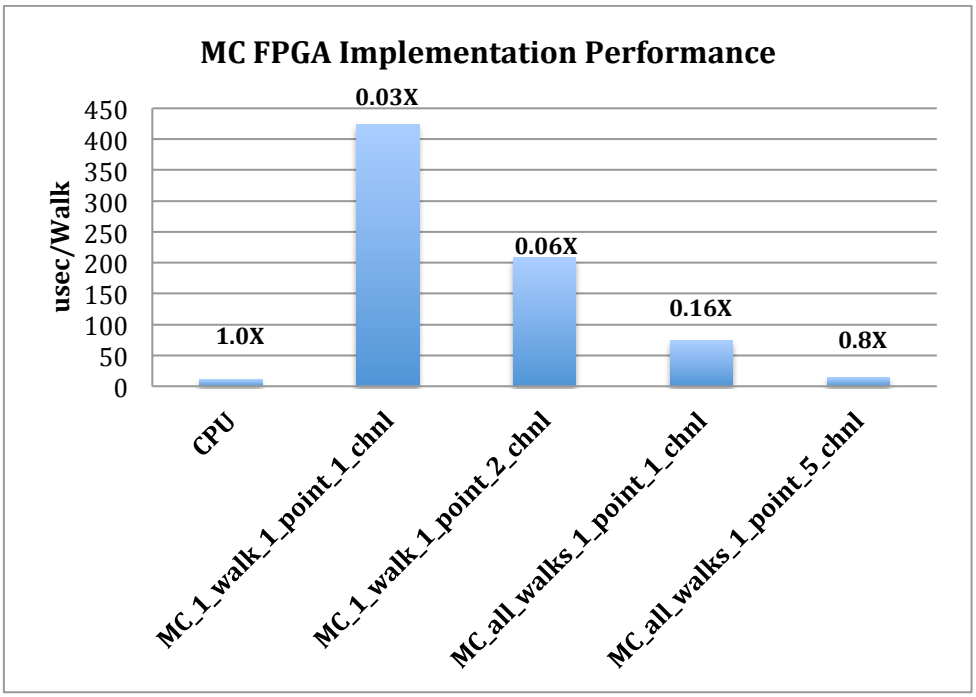
Blur. Έξι σενάρια υλοποίησης μελετήθηκαν για την εφαρμογή Blur. Το πρώτο σενάριο απεικονίζει την βασική αρχιτεκτονική αναφοράς της Εικόνα 16 (*bram_naive_1_chnl*). Η CPU υποδοχής στέλνει μία μοναδική γραμμή στον πυρήνα του οριζόντιου φίλτρου blur για επεξεργασία και περιμένει την έξοδο του επιταχυντή πριν στείλει την επόμενη γραμμή, έως ότου προσπελαστεί ολόκληρη η εικόνα. Η ίδια διαδικασία ακολουθείται και για το κάθετο blur φίλτρο, με τη διαφορά ότι χρειάζονται 3 γραμμές πριν ξεκινήσει η επεξεργασία. Το σενάριο αυτό έχει εφαρμογή και είναι επιθυμητό όταν δεν υπάρχει αρκετή εσωτερική ή εξωτερική του chip μνήμη για να αποθηκευτεί ολόκληρη η εικόνα, με αποτέλεσμα να τη διαμερίζουμε σε μικρότερα κομμάτια ώστε να χωρέσει στους διαθέσιμους πόρους μνήμης. Μία άλλη εκδοχή αυτού του σεναρίου (*bram_naive_2_chnl*) αναπαράγει το

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

υλικό του ενός RIFFA καναλιού σε 2 κανάλια, για να εκμεταλλευτεί τον παραλληλισμό της Blur εφαρμογής. Παρόλο που το δεύτερο σενάριο βελτιώνει την επίδοση της απλοϊκής υλοποίησης με BRAM, παραμένει χειρότερη από τη βελτιστοποιημένη υλοποίηση σε CPU. Η αποστολή μικρών πακέτων δεδομένων μέσω του PCIe δεν είναι αποδοτική, καθώς πληρώνουμε συχνά το κόστος εκκίνησης των μεταφορών ανάγνωσης και εγγραφής. Ως αποτέλεσμα, οι μεταφορές πάνω στο PCIe καταλαμβάνουν τα 2/3 του συνολικού χρόνου εκτέλεσης.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 18. Πειραματικά αποτελέσματα επίδοσης των εφαρμογών Blur και Monte-Carlo. Οι αριθμοί πάνω από τις στήλες υποδεικνύουν την σύγκριση σε σχέση με την βέλτιστη CPU υλοποίηση.

Το τρίτο σενάριο του Blur (*ddr_naive_1_chnl*) χρησιμοποιεί την off-chip DDR μνήμη για να αποθηκεύσει το σύνολο της εικόνας αντί να την διαμερίζει σε πολλαπλά τμήματα. Η χρήση της DDR προσφέρει κάποια οφέλη· Οι PCIe μεταφορές ανάγνωσης/εγγραφής καταναλώνουν λιγότερο χρόνο σε σύγκριση με τα πρώτα σενάρια, καθώς εξαλείφουμε το κόστος εκκίνησής τους. Το δεύτερο προνόμιο της DDR είναι ότι δεν χρειάζεται να στείλουμε την ενδιάμεση έξοδο, του οριζόντιου φίλτρου, πίσω στη CPU, αλλά την κρατάμε στη DDR για να την επεξεργαστεί το κάθετο blur φίλτρο και στη συνέχεια να γράψουμε το αποτέλεσμα πίσω στη CPU υποδοχής. Με αυτό τον τρόπο, το τρίτο σενάριο πετυχαίνει μία βελτίωση ως προς το βέλτιστο χρόνο της CPU.

Για να βελτιώσουμε ακόμα περισσότερο την επίδοση του σεναρίου #3, επιτρέπουμε το οριζόντιο blur να ξεκινήσει αμέσως μόλις η πρώτη γραμμή της εικόνας αποθηκευτεί στη DDR αντί να περιμένουμε τη φόρτωση ολόκληρης της εικόνας. Επίσης, επιτρέπουμε την εγγραφή των δεδομένων πίσω στην CPU πριν ο επιταχυντής του κάθετου blur ολοκληρώσει την εκτέλεση του. Τα παραπάνω παρουσιάζονται στο τέταρτο σενάριο (*ddr_overlapped_1_chnl*). Η επικάλυψη της εκτέλεσης των επιταχυντών με τις μεταφορές δεδομένων μεταξύ FPGA και Host είναι δυνατή λόγο του σταθερού τρόπου προσπέλασης δεδομένων που παρουσιάζουν οι πυρήνες του blur. Παρότι αυτή η υλοποίηση εξαλείφει το κόστος των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

περισσότερων μεταφορών, η μετακίνηση δεδομένων μεταξύ DDR και επιταχυντών εισάγει ένα μη αμελητέο κόστος.

Πίνακας 3. Αποτελέσματα χωρικών απαιτήσεων για το σύνολο των διαφορετικών υλοποιήσεων με βάση τη χρήση των υλικών πόρων της XC7VX485T FPGA

Benchmark	LUT	FF	BRAM	DSP48
BLUR				
bram_naive_1_chnl	15%	10%	5%	11%
bram_naive_2_chnl	28%	20%	10%	23%
ddr_naive_1_chnl	20%	15%	6%	5%
ddr_overlapped_1_chnl	20%	15%	6%	5%
ddr_streaming_1_chnl	13%	9%	4%	3%
ddr_streaming_2_chnl	21%	14%	6%	6%
Monte-Carlo (MC)				
MC_1_walk_1_point_1_chnl	8%	5%	2%	5%
MC_1_walk_1_point_2_chnl	13%	9%	3%	9%
MC_all_walks_1_point_1_chnl	9%	7%	2%	5%
MC_all_walks_1_point_2_chnl	16%	12%	3%	9%

Με σκοπό την περαιτέρω βελτίωση του σχεδίου και την ελαχιστοποίηση του κόστους επικοινωνίας DDR και επιταχυντή, χρησιμοποιούμε συνεχούς ροής AXI-stream διεπαφές για την ανάγνωση δεδομένων από τις FIFOs των καναλιών και για την εγγραφή του αποτελέσματος στην DDR. Το κάθετο blur φίλτρο θα διαβάσει δεδομένα από την DDR, θα τα επεξεργαστεί και θα στείλει την έξοδο κατευθείαν στο κανάλι του RIFFA μέσω μίας συνεχούς ροής AXI-stream διεπαφής. Σε αυτό το σενάριο, εξαλείφουμε το 60% των μετακινήσεων δεδομένων μεταξύ DDR και επιταχυντή. Αυτό είναι εφικτό λόγω της streaming φύσης των πυρήνων του blur. Αυτή η αρχιτεκτονική πετυχαίνει την καλύτερη επίδοση σε σύγκριση με την CPU υλοποίηση. Επιπλέον, καταλαμβάνει μικρότερη περιοχή (βλ. Πίνακα 3) από την απλοϊκή DDR και τις επικαλυπτόμενες υλοποιήσεις, κάτι που επιτρέπει την αναπαραγωγή περισσότερων αντιγράφων του επιταχυντή, για την εκμετάλλευση του παραλληλισμού και την βελτιστοποίηση των επιδόσεων όπως στην περίπτωση του *ddr_streaming_2_chnl*.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Monte-Carlo προσομοίωση. Ο πυρήνας του MC αλγορίθμου είναι υπολογιστικά απιτητικός και με ελάχιστες προσπελάσεις μνήμης. Για αυτό το λόγο, τα διάφορα σενάρια υλοποίησης προκύπτουν από ποικίλες παραμετροποιήσεις των ίδιων των επιταχυντών και από πολλαπλές αναπαραγωγές της εμφάνισης τους. Στο βασικό αρχιτεκτονικό σενάριο, ο επιταχυντής είναι κατασκευασμένος να πραγματοποιεί ένα μοναδικό μονοπάτι από ένα σημείο του πλέγματος σε κάθε χρήση του και μόνο ένας μοναδικός επιταχυντής έχει υλοποιηθεί στην FPGA (*MC_1_walk_1_point_1_chnl*). Αυτό το σενάριο αποδίδει πολύ χειρότερα από την CPU υλοποίηση. Οι πράξεις διπλής ακρίβειας έχουν μεγαλύτερη καθυστέρηση στις FPGA από ότι σε μία CPU. Επίσης, οι βιβλιοθήκες του Vivado HLS για τριγωνομετρικές πράξεις (sin, cos) δεν έχουν τη δυνατότητα διοχέτευσης και είναι λιγότερο αποδοτικές από τις αντίστοιχες της CPU. Η υπεροχή των FPGA βασίζεται στην εκτέλεση πολλών παράλληλων υπολογισμών. Δυστυχώς, οι υπολογισμοί του πυρήνα του MC, πάνω σε ένα μοναδικό μονοπάτι είναι ακολουθιακοί και δεν μπορούν να παραλληλοποιηθούν. Για αυτό το λόγο το βασικό αρχιτεκτονικό σενάριο αποδίδει ανεπαρκώς πάνω στην FPGA. Για να βελτιώσουμε την απόδοση πρέπει να εκμεταλλευτούμε υψηλότερου επιπέδου παραλληλισμό ανάμεσα στα πολλαπλά σημεία και μονοπάτια που εκτελούνται. Το δεύτερο σενάριο περιλαμβάνει δύο εμφανίσεις του επιταχυντή, ώστε να παραλληλοποιήσει τους υπολογισμούς των διαδρομών από ένα μοναδικό μονοπάτι (*MC_1_walk_1_point_2_chnl*). Αποτέλεσμα αυτού είναι να μειωθεί ο χρόνος εκτέλεσης στο μισό, παραμένοντας όμως χειρότερος από τη CPU. Για να πετύχουμε παρόμοιες επιδόσεις με τη CPU πρέπει να αναπαράγουμε γύρω στα 40 αντίγραφα αυτού του επιταχυντή.

Ένα άλλο χαρακτηριστικό προς βελτιστοποίηση είναι η ελαχιστοποίηση του χρονικού κόστους λόγο κλήσεων/χρήσεων του επιταχυντή, αυξάνοντας το επίπεδο υπολογισμών για κάθε μοναδικό επιταχυντή. Αυτό επιτρέπει την διοχέτευση υπολογισμών για πολλαπλά μονοπάτια, κάτι που θα έχει ισχυρή επίδραση στις επιδόσεις. Το τρίτο σενάριο λοιπόν, ελαχιστοποιεί τις κλήσεις του επιταχυντή και το κόστος τους, ρυθμίζοντας τον επιταχυντή να πραγματοποιεί όλα τα μονοπάτια από ένα σημείο ανά κλήση (*MC_all_walks_1_point_1_chnl*). Το τέταρτο σενάριο αναπαράγει πέντε επιταχυντές για να παραλληλοποιήσει τους υπολογισμούς πολλαπλών σημείων (*MC_all_walks_1_point_5_chnl*). Η τελευταία υλοποίηση επιφέρει κορεσμό των πόρων της FPGA και σχεδόν πετυχαίνει την επίδοση της CPU.

7. Βιβλιογραφία

[1] Katherine Compton and Scott Hauck. Reconfigurable computing: a survey of systems and software. *ACM Computing Surveys*. Vol. 34, no. 2. June 2002.

[2] L.H. Crockett, R.A. Elliot. The Zynq Book: Embedded Processing with the Arm Cortex-A9 on the Xilinx Zynq-7000 All Programmable SoC. 2014. Strathclyde Academic Media. *Available at www.zynqbook.com*.

[3] Muhsen Owaida, Nikolaos Bellas, Christos Antonopoulos, Konstantis Daloukas, Charalambos Antoniadis. Massively Parallel Programing Models Used as Hardware Description Languages: The OpenCL Case. *International Conference on Computer-Aided Design (ICCAD),* November 6-10, 2011, San Jose, CA

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[4] David A. Patterson and John L. Hennessy, Computer Organization and Design - The Hardware / Software Interface, (Revised 4th Edition). *The Morgan Kaufmann Series in Computer Architecture and Design.* Academic Press, 2012

[5] V. Vassiliadis, C.D. Antonopoulos, G. Zindros. Automating data management in heterogeneous systems using polyhedral analysis. *Proceedings of the 19th Panhellenic Conference on Informatics (PCI 2015).* Pages 317-322. October 2015. Athens, Greece.

[6] S. Verdoolaege. ISL: An integer set library for the polyhedral model. *In Mathematical Software (ICMS 2010),* pages 299-302. Springer, 2010.

[7] S. Verdoolaege and T. Grosser. Polyhedral extraction tool. In Proceedings of Second International Workshop on Polyhedral Compilation Techniques (IMPACT'12), 2012.

[8] D. K. Wilde. A library for doing polyhedral operations. *Parallel Algorithms and Application*, 15(3-4):137-166, 2000.

[9] Khronos OpenCL Working Group. Editor: A. Munshi, "The OpenCL Specification", Version: 1.1 Document Revision: June 11, 2010.

[10] Konstantinos Krommydas, Wu-Chun Feng, Muhsen Owaida, Christos D. Antonopoulos and Nikolaos Bellas. On the Portability of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Parallel Platforms. *25th IEEE International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP).* June 18-20, 2014, Zurich, Switzerland.

[11] C. Lattner and V. Adve. "LLVM: A Compilation Framework for Lifelong Program Analysis Transformation, *"Proceedings of the International Symposium on Code Generation and Optimization (CGO'04)*, March 2004, pp. 75-86, Palo Alto, CA.

[12] J. Llosa, A. Gonzalez, E. Ayguade, and M. Valero. "Swing Modulo Scheduling: A Lifetime-Sensitive Approach, *"Proceedings of the 1996 Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT)*, October, 1996, pp. 80-86, Boston, MA.

[13] Muhsen Owaida, Nikolaos Bellas, Konstantis Daloukas, Christos D Antonopoulos. Synthesis of Platform Architectures from OpenCL Programs. *IEEE Symposium on Field-Programmable Custom Computing Machines (FCCM)*, May 1-3, 2011, Salt Lake City, UT

[14] Muhsen Owaida, Christos D. Antonopoulos, Nikolaos Bellas. A Grammar Induction Method for Clustering of Operations in Complex FPGA Designs. *IEEE Symposium on Field-Programmable Custom Computing Machines (FCCM), Regular paper.* May 11-13, 2014. Boston, MA

[15] K. Vipin, S. Shreejith, D. Gunasekera, S. *A. Fahmy, N. Kapre*. System-Level FPGA Device Driver with High-Level Synthesis Support. *International Conference on Field Programmable Technology (FPT),* Kyoto, Japan, December 9-11, 2013.

[16] K. Fleming, H. J. Yang, M. Adler, J. Emer. The LEAP FPGA Operating System. *24th International Conference on Field Programmable Logic and Applications (FPL).* Munich, Germany, September 2-4, 2014.

[17] H. J. Yang, K. Fleming, M. Adler, J. Emer. LEAP Shared Memories: Automating the Construction of FPGA Coherent Memories. *22nd International Symposium on Field Programmable Custom Computing Machines (FCCM).* Boston, USA, May 11-13, 2014.

[18] Vivado Design Suite User Guide: High Level Synthesis. *Online at www.xilinx.com*.

[19] Altera OpenCL SDK Programming Guide. *Online at www.altera.com.*

[20] M. Jacobsen, R. Kastner. RIFFA 2.0: A reusable integration framework for FPGA accelerators. *23rd International Conference on Field programmable Logic and Applications (FPL).* Porto, Portugal, September 2-4, 2013.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Ζ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 4.1

Συγκερασμός αριθμητικών μεθόδων και λογισμικού

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **4**

2 Μεθοδολογία **6**
2.1 Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ) 6
2.1.1 Η βιβλιοθήκη Dolfin 7
2.1.2 Πεπερασμένα Στοιχεία και Πλέγματα 8
2.1.3 Η Unified Form Language (UFL) 8
2.1.4 Αξιοποίηση Λογισμικού Αιχμής στο Επίπεδο της Γραμμικής Άλγεβρας 10
2.1.5 Εγκατάσταση FEniCS σε Cluster & Cloud 10
2.2 Επέκταση του ΠΕΠ για την Υποστήριξη της Κλάσης Προβλημάτων Ενδιαφέροντος του Έργου 11
2.2.1 Μέθοδος Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία 11
2.2.2 Υβριδική Αιτιοκρατική/Στοχαστική Μέθοδος για Προβλήματα MDMP 12
2.2.3 Μέθοδος Geometric Contraction (GEO) 13
2.2.4 Μέθοδος ROB 14
2.3 Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων (Ετερογενών, Υποδομής Cloud και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης) 15
2.3.1 Αξιοποίηση Ετερογενών Συστημάτων και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης 15
2.4 Χρήση Σύγχρονου Υλικού για την Επίλυση Μεγάλων Αραιών Γραμμικών Συστημάτων 17
2.4.1 Τεχνολογίες Δευτερεύουσας Μνήμης και Αλγοριθμοι Out-of-Core 17
2.4.2 Σύγχρονες Πλατφόρμες Υλικού και Αραιά Γραμμικά Συστημάτα 17
2.4.3 Αλγόριθμοι Εξωτερικής Μνήμης για Μνήμες Τύπου Flash 18
2.4.4 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Web Services 18
2.4.5 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Πλατφόρμα IRaaS 19

3 Πειραματικά Αποτελέσματα **25**
3.1 Επέκταση του ΠΕΠ για την Υποστήριξη της Κλάσης Προβλημάτων Ενδιαφέροντος του Έργου 25
3.1.1 Μέθοδος Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία 25

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.1.2 Υβριδική Αιτιοκρατική/Στοχαστική Μέθοδος για Προβλήματα MDMP 30
3.1.3 Μέθοδος Geometric Contraction (GEO) 32
3.2 Χρήση Σύγχρονων Τεχνολογιών Υλικού για την Επίλυση Μεγάλων Αραιών Γραμμικών Συστημάτων 35
3.2.1 Τεχνολογίες Δευτερεύουσας Μνήμης και Αλγοριθμοι Out-of-Core 35
3.2.2 Σύγχρονες Πλατφόρμες Υλικού και Αραιά Γραμμικά Συστημάτα 37
3.2.3 Αλγόριθμοι Εξωτερικής Μνήμης για Μνήμες Τύπου Flash 39
3.3 Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Υποδομής Cloud 42
3.3.1 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Web Services 42
3.3.2 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Πλατφόρμα IRaaS 44

4 Παραδοτέα 49

5 Συνεργασίες 51

6 Μελλοντικές Δράσεις 51

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Τα τελευταία χρόνια αποτελεί κοινή διαπίστωση των εμπλεκομένων με την σχεδίαση και ανάπτυξη λογισμικού για ευρείας κλίμακας επιστημονικούς υπολογισμούς η αναγκαιότητα για την ανάπτυξη:

- Ενός λειτουργικού περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων (Problem Solving Environment - PSE) το οποίο, εστιαζόμενο στα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της κλάσης των υπό μελέτη προβλημάτων, διευκολύνει την αποδοτική χρήση (και επανάχρηση) των λογισμικών μονάδων που είτε προϋπάρχουν είτε αναπτύσσονται.

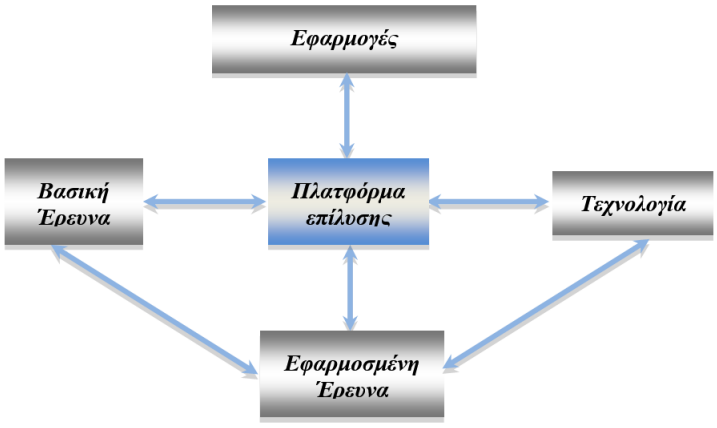
- Μιας καινοτόμου πρακτικής ανάπτυξης λογισμικού η οποία θα μας επιτρέψει να εκμεταλλευτούμε τις δυνατότητες των σύγχρονων υπολογιστικών μηχανών.

Η διαπίστωση της αναγκαιότητας αυτής, η οποία αποκτά ιδιαίτερη σημασία για σύνθετα προβλήματα όπως αυτά με τα οποία ασχολείται το MATENVMED, αποτέλεσε την κινητήρια δύναμη για αρκετές προηγούμενες ερευνητικές προσπάθειες (όπως για παράδειγμα οι [13, 15, 18, 25, 37, 17]). Όμως, ελάχιστες από τις προσπάθειες αυτές πρότειναν λύσεις και πρακτικές με τον απαραίτητο βαθμό καινοτομίας για να ανταποκριθούν στις απαιτήσεις των προβλημάτων μας.

Η φυσική πραγματικών και μεγάλων προβλημάτων επιβάλλει αυτά να αντιμετωπιστούν με πολλά και διαφορετικά μοντέλα, ώστε το αρχικό πρόβλημα να προσομοιωθεί και να λυθεί με το βέλτιστο δυνατό τρόπο. Η μεθοδολογία χαλάρωσης της διεπαφής αντιμετωπίζει σύνθετα προβλήματα και ορίζεται σε ένα αρκετά υψηλό επίπεδο με αποτέλεσμα να υποστηρίζει την ετερογένεια σε όλα τα επίπεδα υλοποίησης του προβλήματος. Τα Περιβάλλοντα Επίλυσης Προβλημάτων (Problem Solving Environments, PSEs) σχεδιάζονται και υλοποιούνται εδώ και αρκετά χρόνια και υποστηρίζουν υψηλό επίπεδο αφαίρεσης και ετερογένειας τόσο στο επίπεδο φυσικής και μαθηματικών όσο και στο επίπεδο υλοποίησης, προγραμματισμού, μηχανών εκτέλεσης, υπολογισμού και οπτικοποίησης της λύσης.

Τα σύγχρονα PSEs αποτελούνται από πολλές και διαφορετικές υπομονάδες λογισμικού (modules). Ο ορισμός, η συσχέτιση και επικοινωνία μεταξύ τους πραγματοποιούνται σε υψηλό επίπεδο. Τα σύγχρονα PSEs οφείλουν να στοχεύουν στην αποδοτική τους εκτέλεση, με όσο το δυνατό περισσότερο διάφανο στον τελικό χρήστη τρόπο, σε συστήματα τελευταίας τεχνολογίας (για παράδειγμα ετερογενή συστήματα με GPUs και FPGAs), όπως επίσης και Clusters ή ακόμα και στο Cloud. Επίσης οφείλουν να εκμεταλλεύονται οποιαδήποτε επιπλέον δυνατότητα παρέχεται από το υλικό, όπως για παράδειγμα γρήγορα μέσα μόνιμης

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 1: Συνολική αρχιτεκτονική MATENVMED

αποθήκευσης (flash storage). Έχουν πολλές επιπλέον ιδιότητες σε σχέση με τα παλαιότερα PSEs όπως ευκαμψία, αποδοτικότητα, συνέπεια, ασφάλεια, δυναμικότητα στη δημιουργία νέων υπομονάδων και στην χρήση των πλέον αποδοτικών αλλά και ισχυρών υπολογιστικών πόρων, τόσο τοπικά όσο και απομακρυσμένα.

Η παρούσα δράση σχεδιάζει με σαφήνεια μια αρχιτεκτονική αναφοράς, η οποία φιλοδοξεί να θέσει τις βάσεις για μια ενοποιημένη προσέγγιση αντιμετώπισης των σύνθετων προβλημάτων που απασχολούν το έργο MATENVMED, καλύπτοντας τις δύο προαναφερθείσες αναγκαιότητες. Όπως φαίνεται στην Εικόνα 1, η πλατφόρμα επίλυσης προβλημάτων αποτελεί κεντρικό σημείο του έργου, καθώς καλείται να ενοποιήσει και να συγκεράσει τις ερευνητικές προσπάθειες που αναπτύσσονται στις υπόλοιπες δράσεις του έργου.

Πιο συγκεκριμένα, οι σημαντικότεροι στόχοι της παρούσας δράσης είναι οι ακόλουθοι:

- Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ).
- Επέκταση του ΠΕΠ για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου.
- Επέκταση του ΠΕΠ για την αξιοποίηση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ετερογενών συστημάτων, υποδομής cloud, αλλά και σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage).

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής: Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα πειραματικά αποτελέσματα. Στην παράγραφο 4 αναφερόμαστε στα παραδοτέα που παρήχθησαν

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

στα πλαίσια της δράσης. Στην παράγραφο 5 περιγράφουμε τις συνεργασίες που αναπτύχθηκαν, ενώ η παράγραφος 6 ολοκληρώνει την έκθεση με τη συζήτηση πιθανών επεκτάσεων της υποδομής που παράχθηκε στα πλαίσια της δράσης.

2 Μεθοδολογία

2.1 Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ)

Βασική επιλογή της ομάδας του έργου αποτέλεσε η απόφαση να εξαντληθεί κάθε περιθώριο αξιολόγησης και αξιοποίησης υπαρχόντων περιβαλλόντων επίλυσης προβλημάτων (ΠΕΠ). Με τον τρόπο αυτό, θα ήταν εφικτό να επικεντρωθεί η προσπάθεια της ομάδας στο ερευνητικό αντικείμενο του έργου, δηλαδή την υποστήριξη εφαρμογών MDMP (Multi-Domain, Multi-Physics), έναντι της εξαρχής υλοποίησης ενός νέου ΠΕΠ. Βασικά κριτήρια κατά τη φάση αξιολόγησης των υπαρχόντων ΠΕΠ ήταν τα ακόλουθα:

- Υποστήριξη επίλυσης διαφορικών εξισώσεων.
- Ανοιχτού κώδικα, ώστε να είναι δυνατή η ανάπτυξη της απαιτούμενης υποστήριξης για τις εφαρμογές και τις πλατφόρμες ενδιαφέροντος του έργου. Με άδεια χρήσης που δε θα απαγορεύει τις απαιτούμενες από το έργο δραστηριότητες.
- Ευρεία και ενεργή κοινότητα ανάπτυξης και υποστήριξης.
- Δυνατότητα χρήσης τεχνολογίας (βιβλιοθηκών) αιχμής στο επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας.
- Απλή διεπαφή χρήστη.
- Δυνατότητα χρήσης ως ανεξάρτητο τμήμα λογισμικού στα πλαίσια μεγαλύτερων εφαρμογών.

Το πακέτο FEniCS [21] βρέθηκε να ικανοποιεί κατά τον καλύτερο τρόπο όλα τα παραπάνω κριτήρια. Αποτελεί συλλογή ελεύθερων εργαλείων λογισμικού εξειδικευμένων στην αυτόματη και αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Η παράγραφος αυτή προσφέρει μια σύντομη επισκόπηση των τμημάτων του FEniCS που έχουν ενδιαφέρον στα πλαίσια του έργου. Λεπτομερέστερη περιγραφή μπορεί να βρεθεί στο βιβλίο του FEniCS [21] το οποίο είναι διαθέσιμο ελεύθερα στο βασικό ιστότοπο[1] του FEniCS.

[1] http://fenicsproject.org/book/index.html#book

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά του FEniCS, τα οποία αυτοματοποιούν τις φάσεις δημιουργίας και επίλυσης των συστημάτων που απαιτούνται για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων, είναι τα ακόλουθα:

Dolfin [22]: Η βασική διεπαφή χρήστη. Αποκρύπτει τις λεπτομέρειες υλοποίησης των επιμέρους στοιχείων του FEniCS και προσφέρει ένα πλήρες API στον χρήστη, επιτρέποντάς του να αξιοποιήσει όλες τις υπηρεσίες της πλατφόρμας.

UFL [3]: Η Unified Form Language είναι η σημειογραφία έκφρασης των PDEs που προσφέρει η διεπαφή χρήστη. Η σημειογραφία αυτή βρίσκεται πολύ κοντά στη μαθηματική σημειογραφία (περισσότερες λεπτομέρειες για τη UFL θα συζητηθούν στην παράγραφο 2.1.3).

Πλήθος χώρων πεπερασμένων στοιχείων ώστε ο χρήστης να επιλέξει το κατάλληλο για το εκάστοτε πρόβλημα, τόσο για 2D, όσο και για 3D χωρία.

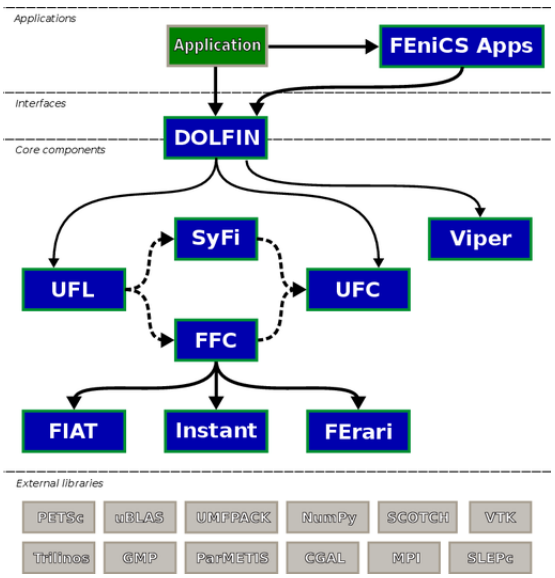
Πλήθος πακέτων γραμμικής άλγεβρας που υποστηρίζουν διαφορετικές οικογένειες επιλυτών. Τα περισσότερα είναι παραμετροποιήσιμα από το χρήστη.

Επιπλέον, το FEniCS αποτελεί ένα πλήρες και καλά ελεγμένο (τόσο ατομικά όσο και σε επίπεδο διαλειτουργικότητας) σύνολο εργαλείων που διευκολύνει την ανάπτυξη νέων μεθόδων. Η Εικόνα 2 απεικονίζει τη δομή του FEniCS. Η ανάπτυξη στα πλαίσια του MATENVMED επικεντρώνεται κυρίως στη διεπαφή Dolfin του FEniCS και την ικανότητα υποστήριξης νέων βιβλιοθηκών στα κατώτερα επίπεδα με διάφανο τρόπο.

2.1.1 Η βιβλιοθήκη Dolfin

Το Dolfin [22] είναι βιβλιοθήκη C++/Python που λειτουργεί ως η βασική διεπαφή χρήστη του FEniCS. Υλοποιεί μεγάλο μέρος της λειτουργικότητας του FEniCS, συμπεριλαμβανομένων δομών δεδομένων και αλγορίθμων για την παραγωγή πλεγμάτων (meshes) και τη συγκρότηση συστημάτων πεπερασμένων στοιχείων. Τελικά παρέχει ένα ΠΕΠ για μοντέλα βασισμένα σε PDEs. Προκειμένου να παρέχει μια απλή και συνεπή διεπαφή χρήστη, το Dolfin λειτουργεί ως περιτύλιγμα (wrapper) της λειτουργικότητας άλλων τμημάτων του FEniCS καθώς και εξωτερικού λογισμικού και είναι υπεύθυνο για τη σωστή επικοινωνία μεταξύ τους.

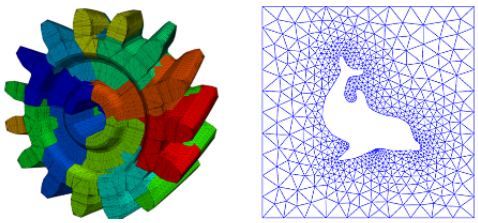
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 2: Η δομή του FEniCS [21, σελ. 172]

2.1.2 Πεπερασμένα Στοιχεία και Πλέγματα

Το FEniCS προσφέρει εκτεταμένη βιβλιοθήκη πεπερασμένων στοιχείων. Επιπλέον παρέχει πλήρως κατανεμημένα πλέγματα σε 1 (διαστήματα), 2 (τρίγωνα) και 3 (τετράεδρα) διαστάσεις. Τα πλέγματα είναι δυνατό να γίνονται λεπτομερέστερα με προσαρμοστικό τρόπο. Επιπλέον, προσφέρεται υποστήριξη για παράλληλο υπολογισμό μέσω διαίρεσης του πλέγματος σε υποπλέγματα. Ένα παράδειγμα φαίνεται στην Εικόνα 3.



Εικόνα 3: Πλέγματα 3D & 2D [21, σελ. 214, 205]

2.1.3 Η Unified Form Language (UFL)

Η UFL [3] είναι ένα από τα κεντρικά συστατικά στοιχεία του FEniCS. Πρόκειται για γλώσσα πεδίου για την έκφραση διακριτοποιήσεων πεπερασμένων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

στοιχείων, την έκφραση μη γραμμικών PDEs και την αυτόματη διαφόριση εκφράσεων και φορμών. Πιο συγκεκριμένα, η γλώσσα ορίζει μια ευέλικτη διεπαφή χρήστη για τη μοντελοποίηση χώρων πεπερασμένων στοιχείων και την έκφραση ασθενών διατυπώσεων (weak formulations) σε σημειογραφία που προσεγγίζει τη μαθηματική. Μπορεί να χειριστεί περίπλοκα προβλήματα με εύκολο, κομψό και αποδοτικό τρόπο.

Οι ασθενείς διατυπώσεις αποτελούν σημαντικό εργαλείο για την ανάλυση εξισώσεων. Επιτρέπουν τη μεταφορά αρχών και μεθόδων γραμμικής άλγεβρας στην επίλυση προβλημάτων σε άλλα πεδία, όπως στις μερικές διαφορικές εξισώσεις. Σε μία ασθενή διατύπωση η εξίσωση δεν απαιτείται πλέον να ικανοποιείται σε κάθε σημείο, αλλά αντίθετα έχει ασθενείς λύσεις ως προς διανύσματα ή συναρτήσεις ελέγχου [32, p. 24]. Αυτή η προσέγγιση είναι, για παράδειγμα, ισοδύναμη με τη διατύπωση ενός προβλήματος ώστε να απαιτεί λύση στη μορφή μιας κατανομής.

Η φιλική προς το χρήστη σημειογραφία και η υποστήριξη για ταχεία ανάπτυξη αποτελούν κεντρικές αξίες της σχεδίασης της UFL. Η χρήση σημειογραφίας κοντά στη μαθηματική επιτρέπει την εύκολη έκφραση ιδεών, μειώνοντας σημαντικά την πιθανότητα εισαγωγής σφαλμάτων στον κώδικα.

Παρακάτω ακολουθεί παράδειγμα έκφρασης της εξίσωσης Poisson σε UFL [21, p. 3]:

$$\underbrace{\int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x}_{a(u,v)} = \underbrace{\int_\Omega f v \, \mathrm{d}x}_{L(v)} \quad \forall v \in V.$$

Ο Κώδικας 1 αντιστοιχεί στην έκφραση της εξίσωσης στη σημειογραφία του FEniCS:

Κώδικας 1: Ορισμός PDE σε σημειογραφία FEniCS UFL

```
1 u = TrialFunction(V)
2 v = TestFunction(V)
3
4 a = dot(grad(u), grad(v))*dx
5 L = f*v*dx
```

Ο Κώδικας 2 αντιστοιχεί στις εντολές που απαιτούνται για την επίλυση του προβλήματος:

Κώδικας 2: Επίλυση PDE σε FEniCS UFL

```
1 u = Function(V)
2 solve(a == L, u, bc)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.1.4 Αξιοποίηση Λογισμικού Αιχμής στο Επίπεδο της Γραμμικής Άλγεβρας

Το FEniCS ενσωματώνει και παρέχει ενιαίο τρόπο αξιοποίησης πλήθους βιβλιοθηκών γραμμικής άλγεβρας υψηλής επίδοσης, μέσω ενός κοινού για όλες περιτυλίγματος (wrapper). Ενσωματώνεται υποστήριξη για τις βιβλιοθήκες PETSc [9], Trilinos/Epetra [14], uBLAS [1] και MTL4 [2]. Ορισμένες από τις βιβλιοθήκες μπορούν εγγενώς να εκμεταλλευτούν παράλληλα συστήματα (PETSc, Epetra).

Ο χρήστης μπορεί εύκολα να εναλλαχθεί μεταξύ βιβλιοθηκών γραμμικής άλγεβρας στο χαμηλότερο επίπεδο, αλλάζοντας απλά την τιμή μιας παραμέτρου στον κώδικά του στο επίπεδο του Dolphin.

2.1.5 Εγκατάσταση FEniCS σε Cluster & Cloud

Αφού ολοκληρώθηκε η εγκατάσταση της πλατφόρμας FEniCS, έγινε δοκιμαστική λειτουργία και έτρεξαν ενδεικτικά προβλήματα, που έχει έτοιμα η πλατφόρμα, αφενός να γίνει εξοικείωση με τη χρήση της και αφετέρου να εξεταστούν οι δυνατότητες και ελλείψεις της. Πραγματοποιήθηκε η εγκατάσταση εξολοκλήρου της πλατφόρμας σε cluster περιβάλλον (στο Τμήμα Τηλεπικοινωνιακών Συστημάτων και Δικτύων του ΤΕΙ Δ. Ελλάδας), και σε μικρής κλίμακας υποδομή cloud (στο Εργαστήριο Αναγνώρισης Προτύπων του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών).

Το cluster, στο οποίο εγκαταστάθηκε η FEniCS, αποτελείται από 14 blades, από τα οποία χρησιμοποιήθηκαν τα 2. Τα blades μεταξύ τους επικοινωνούν με infiniband δίκτυο. Το κάθε blade έχει 4 πυρήνες (Intel(R) Xeon(R) CPU E5530 @ 2.40GHz), 6GB RAM, και 256GB σκληρό δίσκο. Το λειτουργικό το οποίο τρέχει πάνω στο cluster είναι το SL5 (Scientific Linux 5) το οποίο είναι ουσιαστικά κλώνος του RH6. Η εγκατάσταση έγινε σε VM του Ubuntu Server και από εκεί και πέρα συνεχίστηκε η παραμετροποίηση και εγκατάσταση της FEniCS.

Ακολούθησε η εγκατάσταση της FEniCS στην cloud υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων, του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών το οποίο αποτελείται από Intel(R) Xeon(R) CPU E3-1220@3.10GHz με 4 cores και 16GB RAM. Το λειτουργικό το οποίο τρέχει στους κόμβους του cloud είναι το Ubuntu Server Edition. Η διαδικασία η οποία και χρησιμοποιήθηκε για την δημιουργία των cloud VM αναφέρεται στις εργασίες [19, 31].

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.2 Επέκταση του ΠΕΠ για την Υποστήριξη της Κλάσης Προβλημάτων Ενδιαφέροντος του Έργου

Ο βασικός στόχος των επεκτάσεών μας είναι η σχεδίαση και υλοποίηση ενός ανοιχτού, βελτιωμένου περιβάλλοντος μετα-υπολογισμού το οποίο θα υποστηρίζει προβλήματα πολλαπλών χωρίων / πολλαπλών τελεστών (Multi-Domain / Multi-Physics – MDMP), χωρίς να απαιτούνται αλλαγές στα χαμηλά επίπεδα του FEniCS (δημιουργία συστημάτων, γραμμική επίλυση συστημάτων κλπ). Η πλατφόρμα μας αξιοποιεί και επεκτείνει το Python API του Dolphin, καθώς η σύνταξη της Python είναι πλησιέστερη στη UFL, ενώ ταυτόχρονα είναι καταλληλότερη και για ταχεία ανάπτυξη κώδικα. Η υποστήριξη για προβλήματα MDMP υλοποιείται πάνω από την προυπάρχουσα λειτουργικότητα, είτε ως Python modules αξιοποιώντας υπάρχουσες δομές δεδομένων και κλάσεις, είτε ως εξωτερικές, δυναμικά διασυνδεόμενες βιβλιοθήκες C++, οι οποίες παρουσιάζονται ως Python modules με χρήση του SWIG [10].

Η πλατφόρμα στοχεύει στην υποστήριξη μεγάλου εύρους προβλημάτων με τον ίδιο γενικό σχεδιασμό. Πιο συγκεκριμένα, υποστηρίζονται περίπλοκα σχήματα για τα υποχωρία και τις διεπαφές μεταξύ τους. Επίσης υποστηρίζονται 2-διάστατες και 3-διάστατες γεωμετρίες.

Βασική προϋπόθεση για την υποστήριξη MDMP προβλημάτων είναι η δυνατότητα χρήσης διαφορετικών διαφορικών τελεστών, διαφορετικής διακριτοποίησης και ενδεχομένως και διαφορετικών επιλυτών σε κάθε υποχωρίο. Το FEniCS υποστηρίζει ήδη τον ορισμό ανεξάρτητων υποχωρίων. Η πλατφόρμα μας αξιοποιεί την υπάρχουσα υποδομή και χτίζει επάνω της.

2.2.1 Μέθοδος Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία

Υλοποιήθηκε η επαναληπτική μέθοδος additive Schwartz [11, chapter 2.1] για προσαρμογή των διεπαφών σε προβλήματα με μερικώς επικαλυπτόμενα χωρία και χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια του FEniCS για την υποστήριξη των αντίστοιχων MDMP προβλημάτων.

Η γεωμετρία, οι διεπαφές, η διακριτοποίηση, οι συνοριακές τιμές και οι εξισώσεις που ισχύουν σε κάθε υποχωρίο περιγράφονται με χρήση UFL και Dolphin σε ένα ξεχωριστό αρχείο για κάθε υποχωρίο. Αυτή η οργάνωση αντιμετωπίζει τα υποχωρία ως διακριτές μονάδες κώδικα, διευκολύνοντας την παράλληλη ή κατανεμημένη επίλυση των υποπροβλημάτων που αφορούν διαφορετικά υποχωρία.

Όλοι οι τύποι δεδομένουν που χρησιμοποιούνται είναι αντικείμενα είτε της Python είτε του FEniCS. Δεν υπάρχουν εξαρτήσεις από εξωτερικό λογισμικό.

Κάθε αντικείμενο που αντιπροσωπεύει ένα υποχωρίο πρέπει να επαναορίσει (override) έναν αριθμό μεθόδων που καλούνται εμμέσως πριν από κάθε εκτέ-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

λεση του επιλυτή.

`init()` Η μέθοδος αυτή διατηρεί τον ορισμό UFL του υποχωρίου. Θέτει ως attributes του αντικειμένου που αντιστοιχεί στο υποχωρίο το χώρο συναρτήσεων του υποχωρίου καθώς και τη γραμμική και δι-γραμμική μορφή της μερικής διαφορικής εξίσωσης.

`neighbors()` Παρέχει πληροφορία στον επιλυτή σχετικά με τα άλλα υποχωρία που επικαλύπτονται με το τρέχον, έτσι ώστε ο επιλυτής να ανανεώνει αυτόματα τις τιμές στις διεπαφές μετά από κάθε επανάληψη.

`boundaries()` Παρέχει πληροφορία στον επιλυτή σχετικά με τα τυχόν εξωτερικά σύνορα του υποχωρίου.

Το αρχικό σημείο εισόδου στον επαναληπτικό επιλυτή είναι η μέθοδος `solve()`. Λαμβάνει ως παραμέτρους ένα αντικείμενο που περιγράφει την επιθυμητή διαμόρφωση του περιβάλλοντος επίλυσης (μέγιστες επαναλήψεις, επιθυμητή ακρίβεια κλπ) και μια λίστα Python με τα υποχωρία που έχει ορίσει ο χρήστης.

Μετά από κάθε επανάληψη, για κάθε ανεξάρτητη επίλυση υποχωρίου, το σύστημα υπολογίζει έναν interpolant ο οποίος προσεγγίζει την περιγραφή της λύσης στις διεπαφές με γειτονικά υποχωρία. Ο εκάστοτε interpolant αξιοποιείται ώστε τα γειτονικά subdomains να προσαρμόσουν τις εκτιμήσεις των λύσεων στις διεπαφές πριν την επόμενη επανάληψη. Οι interpolants αποτελούν και το μοναδικό τρόπο με τον οποίο ανταλλάσσεται (ελάχιστη) πληροφορία ανάμεσα στα κατά τα άλλα ανεξάρτητα υποπροβλήματα επίλυσης στα υποχωρία.

Τέλος, μετά από κάθε επανάληψη και για κάθε ανεξάρτητη επίλυση υποχωρίου, ο αλγόριθμος ελέγχει ένα σύνολο από κριτήρια τερματισμού (σύγκλιση ή/και μέγιστος αριθμός επαναλήψεων).

Στην παράγραφο 3.1.1 παρουσιάζεται η χρήση της υποδομής Schwarz στο FEniCS για την επαναληπτική επίλυση προβλήματος μοντέλου που αποτελείται από δύο υποχωρία τριών διαστάσεων, αλλά και πραγματικού προβλήματος περιβαλλοντικής μηχανικής σε 2 διαστάσεις.

2.2.2 Υβριδική Αιτιοκρατική/Στοχαστική Μέθοδος για Προβλήματα MDMP

Εισάγαμε επεκτάσεις στο FEniCS για την υποστήριξη υβριδικής αιτιοκρατικής/στοχαστικής μεθόδου επίλυσης προβλημάτων MDMP. Πιο συγκεκριμένα, ένα στοχαστικό βήμα [40] εκτελείται για την εκτίμηση των τιμών στις διεπαφές υποχωρίων, ενώ αξιοποιείται η υπάρχουσα υποστήριξη του FEniCS στο επίπεδο των μεθόδων παρεμβολής και επίλυσης. Αυτή η αρχιτεκτονική απομονώνει το στοχαστικό βήμα της εκτίμησης των τιμών στις διεπαφές από την επίλυση αυτή καθεαυτή, και επιτρέπει την υλοποίηση του στοχαστικού βήματος σε οποιαδήποτε υπολογιστική συσκευή (συμπεριλαμβανομένων CPUs, GPUs ή ακόμα και

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

FPGAs), έτσι ώστε να αξιοποιηθεί ο ευρείας κλίμακας παραλληλισμός που είναι διαθέσιμος στις μεθόδους Monte-Carlo. Η υλοποίησή μας περιλαμβάνει μια έκδοση PosixThreads για CPUs, καθώς και μια έκδοση OpencL [33] για οποιαδήποτε συσκευή υποστηρίζει OpenCL (CPUs, GPUs και FPGAs).

Η λειτουργικότητα υλοποιείται σε C/C++ και προσφέρεται, με χρήση SWIG, στο Dolphin με τη μορφή μιας κλάσης Python `MC`, η οποία παρέχει τη μέθοδο `MC::montecarlo()`. Η τελευταία δέχεται ως παράμετρο την περιγραφή της διεπαφής και επιστρέφει εκτιμήσεις για τις τιμές επάνω στη διεπαφή. Υποστηρίζονται προβλήματα έως και 3 διαστάσεων.

Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδος `montecarlo()` δέχεται της ίδιες παραμέτρους με την κλάση `DirichletBC` του FEniCS και επιπλέον μια περιγραφή του αρχικού χωρίου και του υποχωρίου ενδιαφέροντος. Με χρήση των μεθόδων της κλάσης `DirichletBC` λαμβάνουμε τα σημεία στη διεπαφή και καλούμε τη νέα μέθοδο `montecarlo()` για αυτά. Η κλήση επιστρέφει τις εκτιμώμενες τιμές όλων των σημείων (κόμβων) στη διεπαφή, με τη μορφή ενός νέου αντικειμένου `DirichletBC`, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί οπουδήποτε στον υπόλοιπο κώδικα.

Στην παράγραφο 3.1.2 παρουσιάζεται η χρήση της υποδομής υποστήριξης υβριδικής αιτιοκρατικής/στοχαστικής μεθόδου στο FEniCS για την επίλυση υποπροβλήματος PDE με αρχική στοχαστική εκτίμηση των τιμών στη διεπαφή.

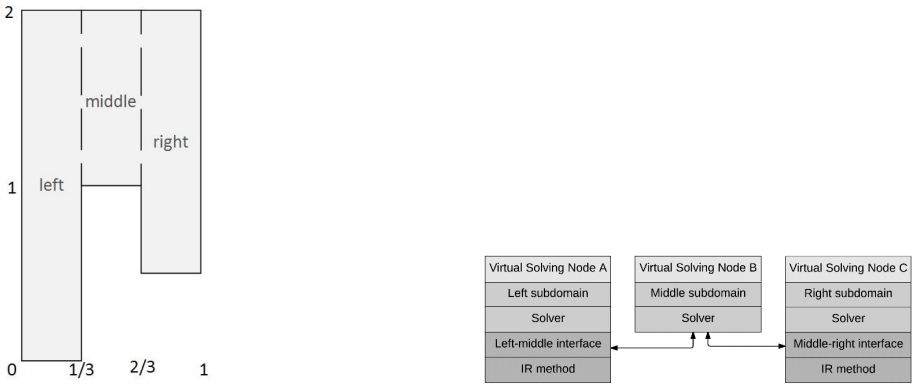
2.2.3 Μέθοδος Geometric Contraction (GEO)

Ακολουθιακή Υλοποίηση της GEO Η μέθοδος geometric (GEO) contraction [39] υλοποιείται σαν ένα πρόγραμμα FEniCS γραμμένο στη γλώσσα UML. Αξιοποιείται η υποστήριξη του Dolfin για την εισαγωγή κλάσεων χρήσιμων για τη δημιουργία των υπο-πεδίων του προβλήματος και τη δημιουργία πλεγμάτων (τριγωνικά στοιχεία) σε αυτά τα υπο-πεδία. Στη συνέχεια δηλώνουμε και εφαρμόζουμε τις οριακές συνθήκες, καθώς επίσης και τις αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές των υπο-πεδίων. Το πρόβλημα PDE πρέπει να εκφραστεί σαν ένα παραμετρικό (variational) πρόβλημα και στη συνέχεια να οριστεί στο πρόγραμμα. Μετά τον υπολογισμό της λύσης, πραγματοποιείται και ο υπολογισμός της παραγώγου. Η δημιουργία κατάλληλων συναρτήσεων για την λήψη των τιμών της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών (όρια των υπο-προβλημάτων), ο υπολογισμός των νέων χαλαρωμένων τιμών και το πέρασμά τους πίσω στα υπο-προβλήματα σαν ανανεωμένες τιμές για τις διεπαφές ήταν οι κυριότερες προκλήσεις της υλοποίησης της GEO.

Παράλληλη Υλοποίηση της GEO Η μέθοδος GEO είναι εγγενώς παραλληλίσιμη. Στην παράλληλη υλοποίησή της κάθε κόμβος (π.χ. εικονική μηχανή σε περιβάλλον cloud) επιλύει ένα υπο-πεδίο. Οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από κάθε κόμβο (που επιλύει ένα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

υπο-πεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υπο-πεδία) στέλνονται σαν ένα μήνυμα RabbitMQ στους κόμβους που επιλύουν τα γειτονικά υπο-πεδία. Μια νέα επανάληψη ξεκινά μόλις οι κόμβοι που διαχειρίζονται τα γειτονικά υπο-πεδία τελειώσουν το βήμα της επικοινωνίας σχετικά με την υπολογιζόμενη λύση. Αυτή η αρχιτεκτονική, για ένα πρόβλημα μοντέλο με τρία υπο-πεδία, απεικονίζεται στο Σχήμα 4. Δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού των μηνυμάτων που ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας.



(α΄) Τοπολογία υποχωρίων (β΄) Κατανεμημένη υλοποίηση GEO

Εικόνα 4: Αρχιτεκτονική κατανεμημένης επίλυσης για τη μέθοδο GEO σε πρόβλημα-μοντέλο με 3 υποχωρία

Στην παράγραφο 3.1.3 δίνεται ενδεικτικός κώδικας ακολουθιακής και παράλληλης (cloud) υλοποίησης της GEO.

2.2.4 Μέθοδος ROB

Ακολουθιακή Υλοποίηση της ROB Η μέθοδος ROB [39] βασίζεται σε Robin συνθήκες στις διεπαφές ώστε να δώσει πληροφορία από τη διεπαφή του ενός υπο-πεδίου στο άλλο. Υλοποιείται με τρόπο παρόμοιο με αυτόν που περιγράφηκε για τη GEO. Η τοπική ΜΔΕ στα υποπεδία λύνεται χρησιμοποιώντας Robin συνθήκες στις διεπαφές, αντιστοιχίζοντας ένα συνδυασμό από Dirichlet και Neumann δεδομένα από τα γειτονικά υποπεδία

Παράλληλη Υλοποίηση της ROB Η επίλυση του κάθε υποπεδίου είναι ανεξάρτητη από των υπολοίπων, οπότε η μέθοδος ROB προσφέρεται για παραλληλοποίηση. Παρόμοια και με την παράλληλη υλοποίηση της GEO, οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από

κάθε κόμβο (που επιλύει ένα υπο-πεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υπο-πεδία) στέλνονται σαν ένα μήνυμα RabbitMQ, έτσι ώστε η νέα επανάληψη να ξεκινήσει και στον άλλο κόμβο. Και πάλι το σχήμα δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές και εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού των μηνυμάτων που ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας.

2.3 Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων (Ετερογενών, Υποδομής Cloud και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης)

2.3.1 Αξιοποίηση Ετερογενών Συστημάτων και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης

Στόχος του έργου MATENVMED είναι η επέκταση του FEniCS για την αξιοποίηση επιλυτών υλοποιημένων σε επιταχυντές, επιλυτών που εκμεταλλεύονται μέσα αποθήκευσης flash, καθώς και για την υποστήριξη επιλυτών εξειδικευμένων σε συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων. Επίσης, θα πρέπει να υποστηρίζονται αντίστοιχες υλοποιήσεις των αλγόριθμων χαλάρωσης στις διεπαφές (για προβλήματα MDMP) και μάλιστα με φυσικό – για την κοινότητα χρηστών του FEniCS – τρόπο. Για το σκοπό αυτό, η εσωτερική διεπαφή προγραμματισμού του FEniCS έχει επεκταθεί με γενικό και αφαιρετικό τρόπο ως προς τον τελικό χρήστη.

Συγκεκριμένα, η σχεδίαση ορίζει μία νέα πρότυπη υλοποίηση (`Whale`) της υψηλού επιπέδου διεπαφής γραμμικής άλγεβρας, η οποία έχει τη δυνατότητα να συνδυάζει διαφορετικές υποστηριζόμενες βιβλιοθήκες γραμμικής άλγεβρας (ενδεχομένως με μετατροπή της μορφής δεδομένων από την μία στην άλλη), καθώς επίσης να ενσωματώνει νέους πειραματικούς επιλυτές στο ήδη υπάρχον μαθηματικό περιβάλλον.

Η συγκεκριμένη προσέγγιση προσφέρει λύση στην ανάγκη για επαλήθευση νέων μεθόδων και επιλυτών επάνω σε μια πλήρη, αποδοτική και παραμετροποιήσιμη πλατφόρμα όπως η πλατφόρμα FEniCS. Με αυτόν τον τρόπο μειώνεται ο χρόνος επαλήθευσης μιας νέας μεθόδου, γνωρίζοντας ότι τα υπόλοιπα συστατικά στοιχεία λειτουργούν και έχουν επαληθευθεί ανεξάρτητα. Επίσης η συγκεκριμένη προσέγγιση προσφέρει τη δυνατότητα εκτέλεσης μεθόδων και επιλυτών σε διαφορετικές μονάδες επεξεργασίας και σε επιταχυντές σε ένα ετερογενές σύστημα, εκμεταλλευόμενη το στοιχείο της παράλληλης επεξεργασίας όπου αυτό είναι δυνατόν, μειώνοντας επιπλέον τον χρόνο υπολογισμού για πολύ μεγάλα προβλήματα. Αντίστοιχα, επιτρέπει την εκτέλεση επιλυτών που αξιοποιούν τυχόν υπάρχουσες γρήγορες μονάδες μόνιμης αποθήκευσης.

Η προσθήκη `Whale`, πέραν των πλεονεκτημάτων προς τον τελικό χρήστη,

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επιτρέπει στον σχεδιαστή επιλυτών να επικεντρωθεί στην εσωτερική βελτίωση της εκάστοτε αναπτυσσόμενης βιβλιοθήκης γραμμικής άλγεβρας και τον ορισμό της διεπαφής με το υπόλοιπο περιβάλλον του FEniCS, δίχως να απαιτείται αλλαγή στα υπόλοιπα λειτουργικά μέρη που το απαρτίζουν.

Η προσθήκη `Whale` αναπτύχθηκε επάνω στον πηγαίο κώδικα της έκδοσης 1.6 του FEniCS. Η ενοποίηση γίνεται εισάγοντας τον κώδικα της προσθήκης με την τεχνική 'μπαλώματος' (patching) στον πηγαίο κώδικα.

Ο χρήστης ελέγχει την ενεργοποίηση και απενεργοποίηση της προσθήκης μέσω των επιλογών ρύθμισης που προσφέρονται. Οι ρυθμίσεις ακολουθούν τη μορφή των υπολοίπων επιμέρους συστατικών του FEniCS και είναι προσβάσιμες από το περιβάλλον Dolphin μέσω της διεπαφής. Η προσθήκη `Whale` μπορεί να χρησιμοποιηθεί και από τις δυο γλώσσες που υποστηρίζονται από το Dolphin, δηλαδή την C++ και την Python.

Οι κλάσεις της διεπαφής γραμμικής άλγεβρας του FEniCS (`GenericVector`, `GenericMatrix`, `GenericLUSolver`, `GenericKrylovSolver`, κα.) έχουν επεκταθεί για να υποστηρίξουν την προσθήκη `Whale`, η οποία υλοποιεί την συγκεκριμένη διεπαφή. Η υλοποίηση όπως είναι αναμενόμενο ακολουθεί το παράδειγμα των ήδη υποστηριζόμενων βιβλιοθηκών γραμμικής άλγεβρας (PETSc, Trilinos κα.).

Η προσθήκη `Whale` είναι απενεργοποιημένη από προεπιλογή και ο χρήστης πρέπει να την ενεργοποιήσει ρητά μέσω κατάλληλης επιλογής ρύθμισης. Για παρά-δειγμα, χρησιμοποιώντας τη διεπαφή Python, ο τελικός χρήστης μπορεί εύκολα να ενεργοποιήσει την προσθήκη `Whale` σε οποιοδήποτε υπάρχον αρχείο πηγαίου κώδικα, απλά προσθέτοντας την παρακάτω εντολή ενεργοποίησης (Κώδικας 3):

Κώδικας 3: Επιλογή ρύθμισης για την ενεργοποίηση της προσθήκης `Whale` μέσω της διεπαφής Python.

```
from dolfin import *

parameters["use_whale_backend"] = True

# rest of the code
```

Με την ενεργοποίηση, η προσθήκη χρησιμοποιεί την προσαρμοσμένη βιβλιοθήκη γραμμικής άλγεβρας που έχει ενσωματώσει ο σχεδιαστής, για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από τον ορισμό του προβλήματος. Εάν δεν υπάρχει διαθέσιμη μία τέτοια προσαρμοσμένη βιβλιοθήκη, η προσθήκη χρησιμοποιεί την προεπιλεγμένη βιβλιοθήκη του FEniCS, έτσι ώστε ο τελικός χρήστης να είναι σε θέση να χρησιμοποιήσει το περιβάλλον με τον συνηθισμένο τρόπο, παρακάμπτοντας εξ ολοκλήρου τον μηχανισμό πρόσβασης σε προσαρμοσμένες βιβλιοθήκες γραμμικής άλγεβρας που προσφέρεται.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.4 Χρήση Σύγχρονου Υλικού για την Επίλυση Μεγάλων Αραιών Γραμμικών Συστημάτων

Η αποδοτική επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων με αραιούς πίνακες είναι θεμελιώδους σημασίας για τις υπολογιστικές επιστήμες, αφού τέτοιου είδους συστήματα απαντώνται κατά την επίλυση προβλημάτων του πραγματικού κόσμου (real world problems). Πιο συγκεκριμένα, στα προβλήματα πολλαπλών πεδίων (multidomain/multiphysics problems) αραιοί πίνακες προκύπτουν κατά την διακριτοποίηση μερικών διαφορικών εξισώσεων (ανεξάρτητα της μεθόδου διακριτοποίησης). Έτσι, τα λογισμικά για την προσομοίωση προβλημάτων πολλαπλών μοντέλων φυσικής (π.χ. COMSOL, ANSYS, Code_Aster, FEniCS) ενσωματώνουν και μεθόδους για την επίλυση αραιών συστημάτων.

2.4.1 Τεχνολογίες Δευτερεύουσας Μνήμης και Αλγοριθμοι Out-of-Core

Για την αντιμετώπιση των αυξημένων απαιτήσεων σε μνήμη στις άμεσες μεθόδους, έχουν προταθεί αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν δευτερεύουσα μνήμη (αλγόριθμοι out-of-core). Οι περισσότερες βιβλιοθήκες λογισμικού για την επίλυση αραιών συστημάτων με άμεσες μεθόδους (π.χ. INTEL MKL PARDISO, MUMPS, PASTIX, TAUCS) περιλαμβάνουν και τέτοιους αλγορίθμους.

Τα τελευταία χρόνια οι μνήμες flash χρησιμοποιούνται ως αποθηκευτικό μέσο σε ενσωματωμένα συστήματα, κινητά τηλέφωνα, φορητούς υπολογιστές και εξυπηρετητές, έχοντας σαφή πλεονεκτήματα έναντι των παραδοσιακών μαγνητικών δίσκων. Οι εξαιρετικές επιδόσεις τους μας έδωσαν κίνητρο να ερευνήσουμε την δυνατότητα αξιοποίησής τους από αλγορίθμους που χρησιμοποιούν εξωτερική μνήμη για την επίλυση αραιών γραμμικών συστημάτων.

Μελετήσαμε την επίλυση αραιών συστημάτων με τα πακέτα: MUMPS [4] [5], την έκδοση του PARDISO [29] [30] που περιλαμβάνεται στην INTEL MKL και το WSMP [8] της IBM. Το PARDISO και το MUMPS υποστηρίζουν την επίλυση συμμετρικών και μη συμμετρικών συστημάτων, ενώ το WSMP υποστηρίζει μόνο συμμετρικά συστήματα. Πραγματοποιήσαμε πειράματα σε μαγνητικό σκληρό δίσκο και σε οδηγό στερεάς κατάστασης (flash SSD) και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στην Παράγραφο 3.2.1.

2.4.2 Σύγχρονες Πλατφόρμες Υλικού και Αραιά Γραμμικά Συστήματα

Η επίλυση αραιών συστημάτων μπορεί να πραγματοποιηθεί είτε με άμεσες είτε με επαναληπτικές μεθόδους. Οι άμεσες μέθοδοι εγγυώνται την επίλυση του συστήματος, εφόσον αυτό έχει λύση, αλλά δεν κλιμακώνουν εύκολα καθώς έχουν σημαντικές απαιτήσεις σε κύρια μνήμη. Από την άλλη, οι επαναληπτικές μέθοδοι

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

είναι ταχύτερες, δεν έχουν μεγάλες απαιτήσεις σε μνήμη και παραλληλοποιούνται εύκολα, αλλά δεν εγγυώνται πάντοτε σύγκλιση.

Η απόδοση κάθε μεθόδου επίλυσης είναι συνυφασμένη με την υποκείμενη υπολογιστική πλατφόρμα. Έτσι, η ανάπτυξη νέων αλγορίθμων, που εκμεταλλεύονται τα πλεονεκτήματα της διαθέσιμης κάθε φορά αρχιτεκτονικής υλικού, έχει σημαντικό ερευνητικό ενδιαφέρον. Με βάση τις παρατηρήσεις αυτές, πραγματοποιήθηκε μια συγκριτική μελέτη άμεσων και έμμεσων μεθόδων για την επίλυση αραιών γραμμικών συστημάτων σε διαφορετικές, σύγχρονες, πλατφόρμες υλικού. Σκοπό της μελέτης αποτέλεσε η ανίχνευση των ορίων και των δυνατοτήτων κάθε μεθόδου και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στην παράγραφο 3.2.2.

2.4.3 Αλγόριθμοι Εξωτερικής Μνήμης για Μνήμες Τύπου Flash

Οι αλγόριθμοι εξωτερικής μνήμης που αφορούν την διαχείριση δεδομένων σε μνήμες flash έχουν αποτελέσει αντικείμενο πρόσφατης έρευνας στο πεδίο των Βάσεων Δεδομένων και κυρίως στις δομές ευρετηρίου (B+tree, R-tree, κτλ). Η έρευνα έχει καταδείξει ότι απαιτείται η περαιτέρω εξέλιξή τους, ώστε να εκμεταλλεύονται αποδοτικότερα τις δυνατότητες της flash. Μερικές από τις τεχνικές που έχουν προταθεί είναι: α) η μετατροπή των «ακριβών» εγγραφών σε τυχαίες θέσεις (random writes), σε εγγραφές σε συνεχόμενες θέσεις (sequential writes) με χρήση log records, β) η αξιοποίηση του «εσωτερικού» παραλληλισμού των δίσκων SSD, με την αύξηση του μεγέθους της εισόδου/εξόδου (I/O) και του αριθμού των εξερχόμενων αιτημάτων ανάγνωσης/εγγραφής (outstanding I/O requests).

Μελετήσαμε την υλοποίηση της μεθόδου Cholesky στην βιβλιοθήκη TAUCS [38, 28] και αναζητήσαμε τεχνικές για την αποδοτικότερη υλοποίησή της για δίσκους στερεάς κατάστασης (flash SSDs). Διερευνήσαμε την χρήση ενδιάμεσων buffers για την πραγματοποίηση μαζικών (batch) εγγραφών και αναγνώσεων των στοιχείων πλήρωσης και των βοηθητικών δομών (π.χ. δέντρο απαλοιφής), καθώς και τις δυνατότητες προ-ανάκτησής τους (pre-fetching) στα διάφορα στάδια της παραγοντοποίησης (factorization) και της επίλυσης (forward elimination, backward substitution). Τα αποτελέσματα της μελέτης παρουσιάζονται στην παράγραφο 3.2.3.

2.4.4 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Web Services

Το έργο MATENVMED οραματίστηκε ένα ριζικά διαφορετικό τρόπο υλοποίησης, δημοσίευσης, διαμοίρασης, αναζήτησης και επαναχρησιμοποίησης πόρων σχετικών με τον επιστημονικό υπολογισμό στην καθημερινή πρακτική. Για το λόγο αυτό είναι αναγκαίο ένα ανοιχτό, ισορροπημένο και διαρκώς εξελισσόμενο οικοσύστημα υπηρεσιών ιστού (web services). Στα πλαίσια του έργου διερευνήσαμε την ιδέα της ανάπτυξης, προσφοράς και χρήσης στα πλαίσια της πλατ-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

φόρμας του έργου υπολογιστικών πακέτων σχετικών με προβλήματα MDMP με διάφανο και αφηρημένο τρόπο, μέσω του παγκόσμιου ιστού. Για το σκοπό αυτό επεκτείναμε την πλατφόρμα με ένα επίπεδο που αξιοποιεί web services και υπακούει σε πρότυπα βασισμένα στην XML [26]:

SOAP: (Simple Object Access Protocol) για την ανταλλαγή δομημένης πληροφορίας μεταξύ web services πάνω από το δίκτυο. Βασίζεται σε άλλα πρωτόκολλα επιπέδου εφαρμογής, όπως το HTTP για τη διαπραγμάτευση και τη μετάδοση μηνυμάτων.

WSDL: (Web Services Description Language) που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της λειτουργικότητας που προσφέρει ένα web service, πως μπορεί να κληθεί, τις παραμέτρους που αναμένει και τις δομές δεδομένων που επιστρέφει.

ebXML: (e-business XML) που επιτρέπει σε παρόχους web services να δημοσιεύσουν τις υπηρεσίες τους και σε καταναλωτές να υποβάλλουν ερωτήματα σχετικά με τη διαθεσιμότητα και την περιγραφή των services.

Ο βασικός τρόπος για την ανάπτυξη ενός επιλυτή MDMP με web services είναι η ακόλουθη. Αρχικά υλοποιούμε τα τμήματα λογισμικού που περιγράφηκαν στην παράγραφο 2.2, η οποιονδήποτε άλλο κώδικα όπως για παράδειγμα επιλυτές γραμμικής άλγεβρας, ως web services και τα δημοσιοποιούμε στον κατάλογο ebXML που διατηρούμε, χρησιμοποιώντας ένα από τα διαθέσιμα για το σκοπό αυτό περιβάλλοντα ανάπτυξης ή πλατφόρμες. Έχουμε υλοποιήσει web services χρησιμοποιώντας WSO2, .Net, Eclipse, ή Spyne [23], ακολουθώντας ένα συστηματικό τρόπο που οδηγεί σε μια διαδικασία ρουτίνας χωρίς ιδιαίτερες προκλήσεις. Ακολούθως, οποιοσδήποτε προγραμματιστής ή ακόμα και λογισμικό μπορεί να υποβάλλει ερωτήματα στο ebXML για συγκεκριμένα services, να λάβει τη λίστα των διαθεσίμων, να επιλέξει το καταλληλότερο και να συνδεθεί μαζί του αξιοποιώντας την πληροφορία στο αντίστοιχο αρχείο WSDL. Αυτή η διαδικασία είναι δυνατό να πραγματοποιηθεί ακόμα και κατά το χρόνο εκτέλεσης.

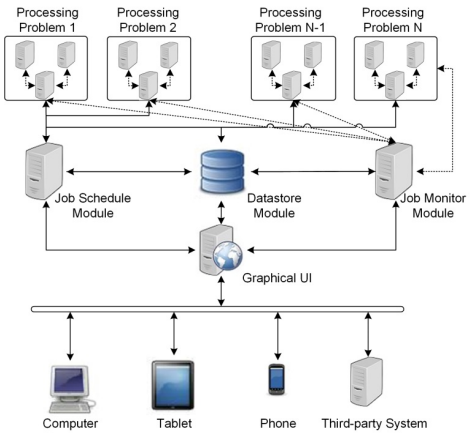
2.4.5 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Πλατφόρμα IRaaS

Σε αυτή την παράγραφο περιγράφεται μία διαφορετική φιλοσοφία σε σχέση με την παράγραφο 3.3.1. Πιο συγκεκριμένα, περιγράφουμε τη σχεδίαση και υλοποίηση μιας προσαρμοσμένης αρχιτεκτονικής cloud για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών που υλοποιεί τη μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή. Ο χρήστης δίνει ένα πρόβλημα σαν είσοδο, επιλέγει την IR μέθοδο που ταιριάζει καλύτερα με το συγκεκριμένο πρόβλημα και έχει πρόσβαση στη λύση σε έναν κοντά στο βέλτιστο χρόνο εκτέλεσης, από οποιοδήποτε μέρος

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

και οποιαδήποτε συσκευή. Συγχρόνως, η εφαρμογή δεσμεύει τους ελάχιστους δυνατούς πόρους αυτόματα, στο παρασκήνιο, χωρίς παρέμβαση του χρήστη.

Για την επίτευξη των παραπάνω στόχων, εγκαταστάθηκε στις υποδομές του εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων μια συγκεκριμένη πλατφόρμα λογισμικού για την παροχή υπηρεσιών Cloud, το CloudStack. Το CloudStack αποτελεί ένα εργαλείο που ελέγχει τη δεξαμενή των υπολογιστικών πόρων καθώς επίσης διαχειρίζεται το δίκτυο και τον αποθηκευτικό χώρο. Η αρχιτεκτονική του συστήματος είναι βασισμένη στο μοντέλο IaaS και SaaS της τεχνολογίας Cloud και ταυτόχρονα στη διαχείριση της κατανομής των υπολογιστικών πόρων του Cloud έτσι ώστε να δημιουργηθούν ομάδες εικονικών μηχανών για παράλληλη και κατανεμημένη επεξεργασία. Υποστηρίζει ένα περιβάλλον για την επίλυση διαφόρων ειδών προβλημάτων και ανάλυσης δεδομένων, παρέχοντας μία απλή και φιλική προς τον χρήστη διεπαφή, αυτόματη διανομή του προβλήματος στους κατάλληλους υπολογιστικούς πόρους, τον απαραίτητο αποθηκευτικό χώρο για τα δεδομένα εισόδου και των αποτελεσμάτων ενός προβλήματος καθώς και την απαιτούμενη επικοινωνία μεταξύ των συστατικών στοιχείων του συστήματος.

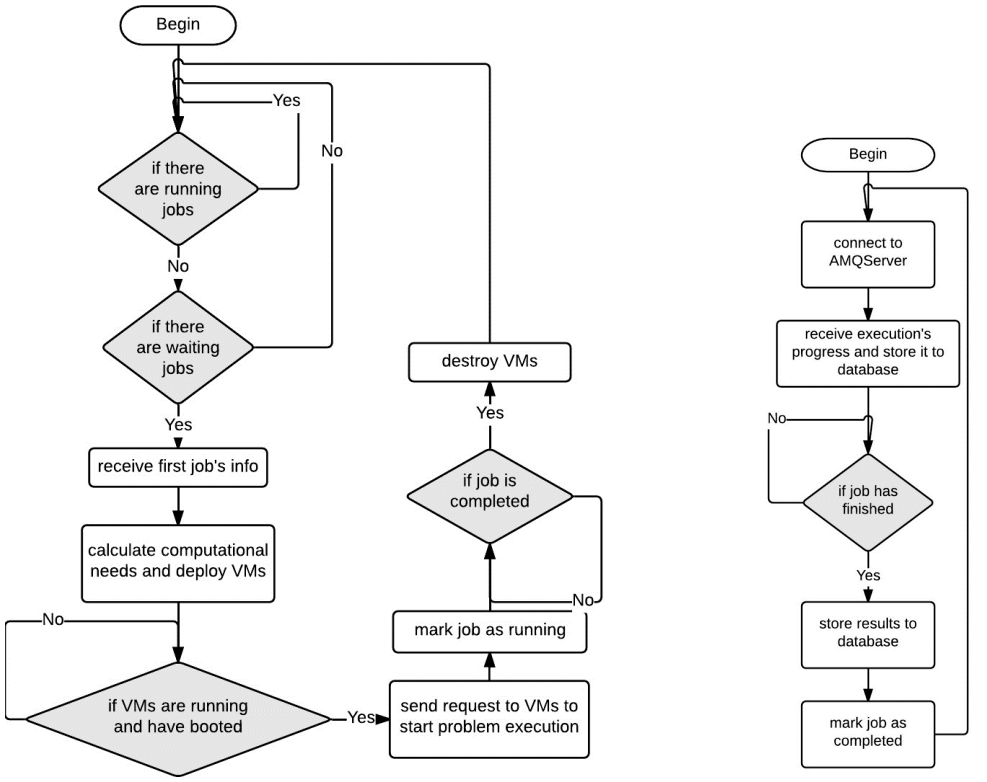


Εικόνα 5: Αρχιτεκτονική IRaaS

Το Σχήμα 5 παρουσιάζει μια επισκόπηση της αρχιτεκτονικής του συστήματος με όλα τα συστατικά στοιχεία του συστήματος και τις αλληλεπιδράσεις τους. Επίσης απεικονίζονται τρεις διαφορετικοί τύποι προβλημάτων έτσι ώστε να γίνει αντιληπτή η δυνατότητα του συστήματος να επιλύει διαφορετικού τύπου προβλήματα. Είναι σημαντικό επίσης να αναφερθεί ότι τόσο η επικοινωνία μεταξύ του Task Monitor με τις διάφορες εικονικές μηχανές κάθε προβλήματος, όσο και η επικοινωνία που έχουν οι εικονικές μηχανές κάθε προβλήματος μεταξύ τους γίνεται μέσω του Advanced Message Queuing Protocol (AMQP) για την ανταλλαγή των μηνυμάτων.

Τα σημαντικότερα συστατικά στοιχεία της αρχιτεκτονικής είναι τα εξής: Η γρα-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(α΄) Διάγραμμα ροής workflow manager

(β΄) Διάγραμμα ροής task monitor

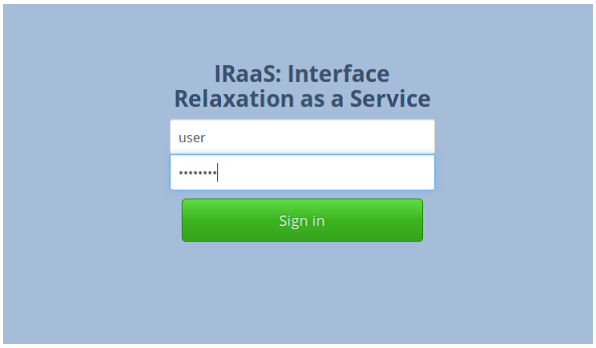
Εικόνα 6: Διαγράμματα ροής workflow manager και task monitor.

φική διεπαφή χρήστη (User Portal), όπου κάθε χρήστης έχει τη δυνατότητα εγγραφής ή σύνδεσης στο λογαριασμό του. Ο Task Monitor εμπεριέχει έναν εξυπηρετητή Advanced Message Queuing Protocol (AMQP) που χειρίζεται την επικοινωνία μεταξύ των οντοτήτων του συστήματος. Ο εξυπηρετητής AMQP είναι βασισμένος στο Message Queuing Protocol (AMQP) το οποίο συνδέει συστήματα και διαχειρίζεται την ανταλλαγή πληροφοριών και μηνυμάτων μεταξύ αυτών. Ο Workflow Manager είναι υπεύθυνος για την ενορχήστρωση και την εκτέλεση ολόκληρης της διαδικασίας στην υποδομή Cloud. Το Datastore ουσιαστικά είναι ένα αποθετήριο όπου αποθηκεύονται όλες οι πληροφορίες όπως τα δεδομένα εισόδου, τα αποτελέσματα και οι ενδιάμεσες πληροφορίες για το πρόβλημα ενός χρήστη. Σε αυτό έχουν πρόσβαση όλα τα στοιχεία του συστήματος και είναι ουσιαστικά η βάση δεδομένων του συστήματος. Τέλος, οι ομάδες εικονικών μηχανών είναι υπεύθυνες για την εκτέλεση της εκάστοτε διαδικασίας επίλυσης ενός προβλήματος.

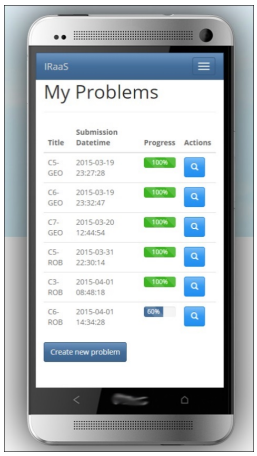
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ο Workflow Manager παρέχει μια σειρά από λειτουργίες που φαίνονται αναλυτικά στο Σχήμα 6(α΄).

Για την απαραίτητη ανταλλαγή μηνυμάτων μεταξύ τόσο του Task Monitor με τις εικονικές μηχανές όσο και αυτών μεταξύ τους, χρησιμοποιήθηκε το RabbitMQ. Το RabbitMQ είναι ένας ελαφρύς, αξιόπιστος, επεκτάσιμος και φορητός μεσολαβητής μηνυμάτων. Ο Task Monitor παρέχει μια σειρά από λειτουργίες που φαίνονται αναλυτικά στο Σχήμα 6(β΄).



(α΄) Σελίδα sign in IRaaS



(β΄) Σελίδα IRaaS (από κινητό) με τα προβλήματα του χρήστη

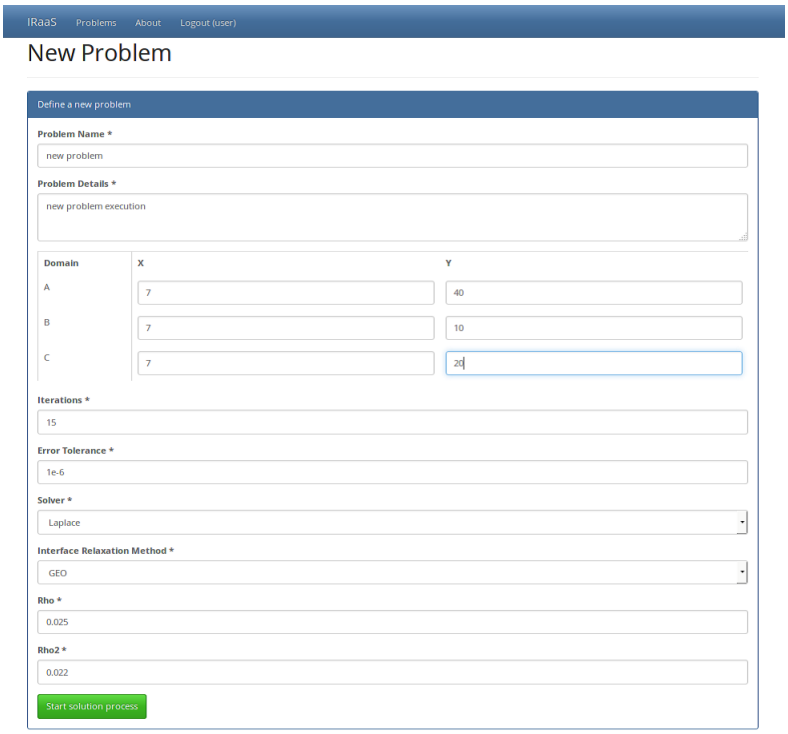
Εικόνα 7: Σελίδες authentication & προβλημάτων IRaaS.

Στην Εικόνα 7(α΄) φαίνεται η οθόνη μέσω της οποίας εισάγεται στο σύστημα ο χρήστης. Αξίζει να σημειωθεί ότι το όνομα που δόθηκε στην υποδομή είναι: “IRaaS: Interface Relaxation as a Service” διότι παρέχεται ένα SaaS μοντέλο για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών με τη χρήση μεθόδων χαλάρωσης στις διεπαφές (Interface Relaxation Methods).

Μετά το authentication ο χρήστης μπορεί να δει μια λίστα που περιλαμβάνει όλα τα προβλήματα που έχει καταθέσει, τις λεπτομέρειες αυτών καθώς και να θέσει προς εκτέλεση ένα νέο πρόβλημα. Η σχετική οθόνη, όπως φαίνεται όταν χρησιμοποιείται από κινητό, απεικονίζεται στην Εικόνα 7(β΄). Στην πρώτη στήλη της οθόνης (“Title”) φαίνεται το όνομα του προβλήματος, στην δεύτερη στήλη (“Submission Datetime”) η ημερομηνία και ώρα κατάθεσής του, στην τρίτη στήλη (“Progress”) η πρόοδος του προβλήματος δηλαδή ποιο είναι το ποσοστό ολοκλήρωσής του και στην τέταρτη στήλη (“Actions”) υπάρχει ένα κουμπί που μόλις πατηθεί ο χρήστης μεταβαίνει σε μία νέα οθόνη που υπάρχουν όλες οι πληροφορίες του προβλήματος καθώς και τα αρχεία αποτελεσμάτων αν έχει ολοκλη-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

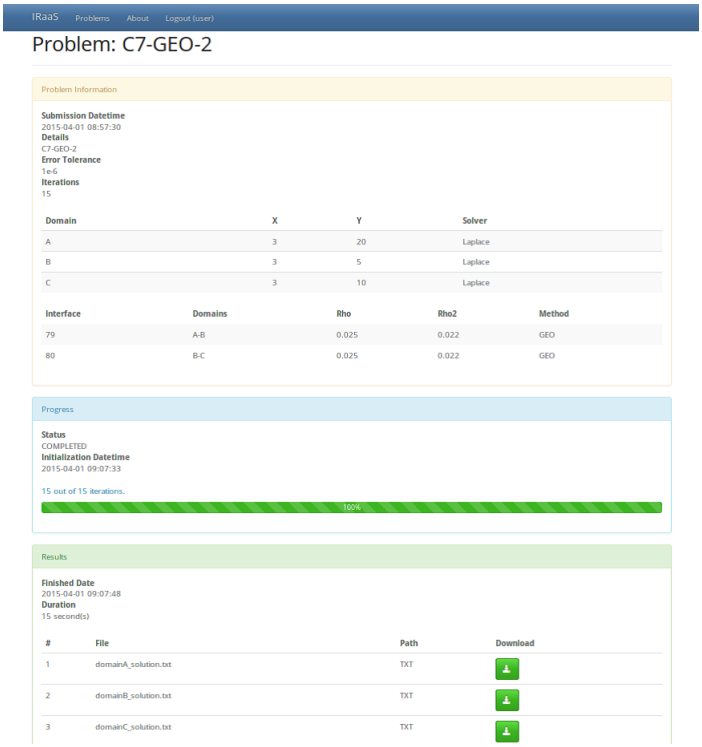
ρωθεί η εκτέλεσή του. Στο κάτω μέρος της οθόνης υπάρχει ένα κουμπί με όνομα “Create new problem” το οποίο, μόλις πατηθεί, μεταβιβάζει το χρήστη σε μία νέα οθόνη, που του παρέχει μια φόρμα ώστε να καταθέσει όλα τα απαραίτητα δεδομένα εισόδου του νέου προς εκτέλεση προβλήματος.



Εικόνα 8: Σελίδα εισαγωγής νέου προβλήματος IRaaS

Στην Εικόνα 8 παρουσιάζεται η οθόνη της εφαρμογής που εμφανίζεται μόλις ο χρήστης πατήσει το κουμπί “Create new problem”. Για την ακρίβεια εμφανίζεται μια φόρμα στην οποία ο χρήστης πρέπει να συμπληρώσει τα στοιχεία του νέου προβλήματος που θέλει να εκτελέσει. Στη φόρμα αυτή δίνει ένα όνομα και μια περιγραφή του νέου προβλήματος, τις τιμές των τριών subdomains καθώς και διάφορες περαιτέρω πληροφορίες που είναι απαραίτητες για την επίλυση του προβλήματος. Επίσης στη φόρμα αυτή επιλέγει από μια drop-down λίστα την επιθυμητή μέθοδο χαλάρωσης με την οποία θέλει να γίνει η ανάλυση (GEO ή ROB) και μόλις συμπληρωθούν όλα τα κελιά, για να αποσταλούν στο σύστημα όλα τα δεδομένα που εισήγαγε και να ξεκινήσει η εκτέλεση, αρκεί να πατήσει το κουμπί “Start solution process” που βρίσκεται το κάτω μέρος της οθόνης. Μόλις αυτό το κουμπί πατηθεί, επιστρέφεται ένα μήνυμα επιτυχίας για την σωστή καταχώρηση των δεδομένων και ο χρήστης μεταβαίνει αυτόματα στην προηγούμενη οθόνη προκειμένου να παρακολουθήσει την πρόοδο του νέου προβλήματος. Αν

δεν έχει γίνει σωστή καταχώρηση των δεδομένων, τότε στην ίδια φόρμα υποδεικνύεται ποιο πεδίο περιέχει λανθασμένη τιμή ή είναι κενό.



Εικόνα 9: Σελίδα προβλήματος IRaaS

Εάν ένας χρήστης πατήσει το κουμπί “Action”, τότε ο χρήστης μεταβαίνει αυτόματα σε μία νέα οθόνη (Εικόνα 9) όπου υπάρχουν όλες οι πληροφορίες του προβλήματος καθώς και τα αρχεία αποτελεσμάτων αν έχει ολοκληρωθεί η εκτέλεσή του. Η συγκεκριμένη οθόνη περιέχει όλα τα δεδομένα εισόδου του προβλήματος, την κατάστασή του (αν έχει ξεκινήσει να εκτελείται ή ποιο είναι το ποσοστό που έχει πραγματοποιηθεί από τη συνολική διαδικασία επίλυσης ή αν έχει ολοκληρωθεί), και αν το πρόβλημα έχει ολοκληρωθεί, περιέχει επίσης την ημέρα και ώρα ολοκλήρωσης του και, πατώντας το κουμπί της στήλης “Download” κάτω δεξιά, τα αρχεία με τα τελικά αποτελέσματα του προβλήματος.

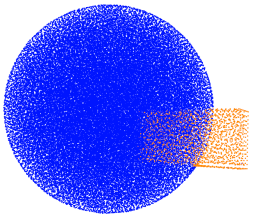
Τέλος, εάν ο χρήστης επιθυμεί να εξέλθει από την εφαρμογή, αρκεί να πατήσει το κουμπί με την ένδειξη “Logout” που υπάρχει στο βασικό μενού, στο πάνω μέρος της κάθε οθόνης της εφαρμογής.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

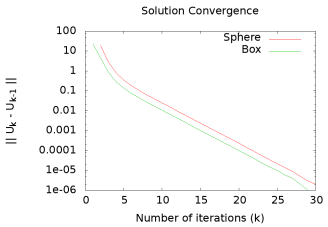
3 Πειραματικά Αποτελέσματα

3.1 Επέκταση του ΠΕΠ για την Υποστήριξη της Κλάσης Προβλημάτων Ενδιαφέροντος του Έργου

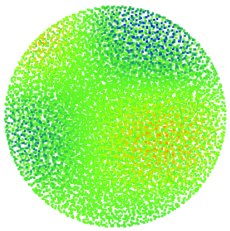
3.1.1 Μέθοδος Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία



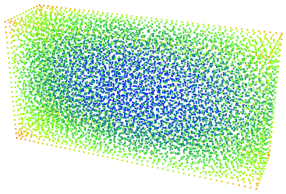
(α΄) Τοπολογία υποχωρίων



(β΄) Ρυθμός σύγκλισης για τα δύο υποπροβλήματα



(γ΄) Η λύση για το υποχωρίο σφαίρα



(δ΄) Η λύση για το υποχωρίο παραλληλεπίπεδο

Εικόνα 10: Ένα μοντέλο 3-διάστατο πρόβλημα με μερικώς επικαλυπτόμενα υποχωρία

Χρήση σε 3D πρόβλημα-μοντέλο Ας θεωρήσουμε ένα μοντέλο 3-διάστατο πρόβλημα με 2 υποχωρία: μία σφαίρα και ένα παραλληλεπίπεδο, τα οποία επικαλύπτονται μερικώς όπως φαίνεται στην Εικόνα 10(α΄). Οι Εικόνες 10(γ΄) και 10(δ΄) απεικονίζουν τη λύση για τα δύο υποχωρία με χρήση του επαναληπτικού επιλυτή Schwarz που υλοποιήθηκε στο FEniCS. Στην Εικόνα 10(β΄) παρουσιάζεται ο ρυθμός σύγκλισης για τα 2 υποπροβλήματα, έως την επίτευξη της επιθυμητής από το χρήστη ακρίβειας.

Κώδικας 4: Ορισμός του παραλληλεπίπεδου υποχωρίου αξιοποιώντας ένα αρχείο-σκελετό.

```
1 # user defined methods
2 def OveralappingWithOther(): pass
3 def userDefinedUFL(): pass
4 def userDefinedBoundaryCondition(): pass
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

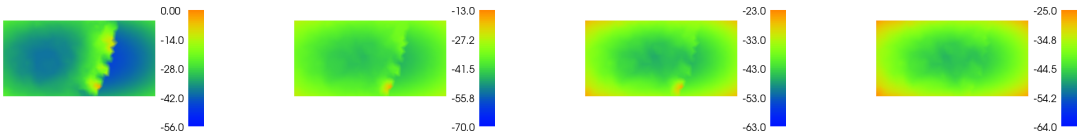
```
5
6  # skeleton example
7  def ExtBC(x,on_boundary):
8      return on_boundary and not OveralappingWithOther()
9
10 def ExtIface(x,on_boundary):
11     return on_boundary and OveralappingWithOther()
12
13 class Problem(ConfigCommonProblem):
14         # Override the API methods init(), neighbours()
15     # and boundaries()
16         def init(self,*args,**kwargs):
17         self.domain_name = 'box'
18         mesh = Mesh(Box(-2,-1,-.5,2,1,.5),128)
19         self.V = FunctionSpace(mesh,'Lagrange',1)
20         self.a, self.L = userDefinedUFL(V)
21
22     # return a dictionary with interfaces for each neighbour
23     def neighbours(self):
24         interface = {}
25         interface[self.domain_name] = ExtIface
26         return interface
27
28         # return a list with all the external boundaries
29     def boundaries(self):
30         bc = DirichletBC(self.V, userDefinedBoundaryCondition(), ExtBC)
31         return [ bc ]
```

Ο Κώδικας 4 αντιστοιχεί στον ορισμό του παραλληλεπίπεδου υποχωρίου (box3D_1.py), ξεκινώντας από έναν κοινό (ανεξάρτητο του υποχωρίου) σκελετό. Παρόμοιος είναι και ο ορισμός του υποχωρίου που αντιστοιχεί στη σφαίρα (sphere3D_1.py).

Κώδικας 5: Επίλυση 3D προβλήματος με 2 μερικώς αλληλεπικαλυπτόμενα υποχωρία.

```
1 from dolfin import *
2 import solverconfig
3 import solver
4
5 # client = hmc.RemoteClient(wsdl_url)
6 # client.set_options(timeout=timeout_in_seconds)
7 client = hmc.LocalClient()
8
9 import sphere3D_1 as sphere
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(α΄) Επανάληψη 1 (β΄) Επανάληψη 2 (γ΄) Επανάληψη 3 (δ΄) Επανάληψη 38

Εικόνα 11: Στιγμιότυπα οριζόντιας τομής του παραλληλεπιπέδου σε διαφορετικές επαναλήψεις του επιλυτή

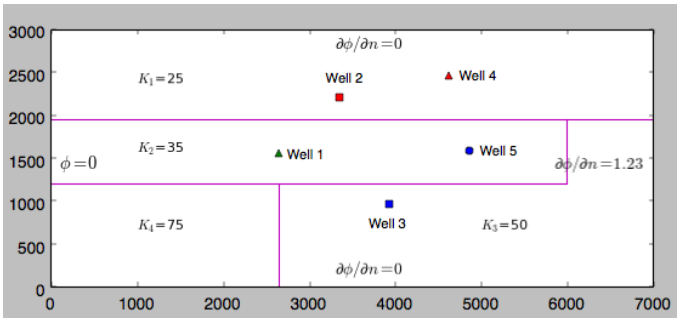
```
10 import box3D_1 as box
11
12 sp = sphere.Problem(client=client)
13 bp = box.Problem(client=client)
14 subdomains=[ sp, bp ]
15
16 config = solverconfig.Config3D()
17 solver.solve(subdomains=subdomains, config=config)
```

Ο Κώδικας 5 οδηγεί τον επαναληπτικό επιλυτή, δεδομένων των ορισμών των υποχωρίων. Η απαιτούμενες αλλαγές από το χρήστη στους 2 σκελετούς απεικονίζονται με έντονους χαρακτήρες. Τα υποχωρία μπορούν να διαθέτουν – και διαθέτουν στο συγκεκριμένο παράδειγμα – διαφορετικά πλέγματα, διακριτοποιήσεις και PDEs. Ο αναγνώστης ας παρατηρήσει επίσης ότι η χρήση ενός απομακρυσμένου επιλυτή είναι εξαιρετικά απλή, αντικαθιστώντας τη γραμμή 7 με τις σχολιασμένες γραμμές 5-6.

Στην Εικόνα 11 απεικονίζεται οριζόντια τομή του παραλληλεπιπέδου σε διαφορετικές επαναλήψεις (1, 2, 3 και 38) του επαναληπτικού επιλυτή. Μπορεί εύκολα κανείς να παρατηρήσει την αρχική έντονη ασυνέχεια στο τόξο τομής με τη σφαίρα, η οποία εξομαλύνεται στις μετέπειτα επαναλήψεις.

Χρήση σε 2D πρόβλημα περιβαλλοντικής μηχανικής Ας θεωρήσουμε την PDE η οποία περιγράφει τη σταθερή κατάσταση του προβλήματος υφαλμύρισης σε παράκτιους υδατοφορείς. Η εξίσωση πρέπει να λυθεί σε κάθε επαναληπτικό βήμα ενός στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης [36, 35, 34], ο οποίος αξιοποιείται ώστε να ελέγξει με βέλτιστο τρόπο την άντληση από όλες της ενεργές πηγές άντλησης (πηγάδια) ενός παράκτιου υδατοφορέα και να τις προστατεύσει από την υφαλμήριση. Η λύση του (δυναμικό ροής) χρησιμοποιείται ώστε να εντοπιστεί το όριο μεταξύ αλμηρού και γλυκού νερού. Ο υδατοφορέας που απεικονίζεται στην Εικόνα 12 προσωμοιώνει πραγματικό παράκτιο υδατοφορέα στο Βαθύ της Καλύμνου [24].

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 12: Υδατοφορέας Καλύμνου.

Πιο συγκεκριμένα, ας θεωρήσουμε την ελλειπτική PDE

$$\frac{\partial}{\partial x}(K\frac{\partial \phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K\frac{\partial \phi}{\partial y}) + N - Q = 0 \quad , \quad (x,y) \in \mathcal{R}, \tag{1}$$

όπου ϕ (m^2) αντιστοιχεί στο δυναμικό ροής του Struck, N (m/day) δηλώνει τη συνολική ημερήσια επαναφόρτιση του υδατοφορέα, ομοιόμορφα κατανεμημένη στην επιφάνειά του, K (m/day) αντιστοιχεί στην υδραυλική διαπερατότητα και Q (m/day) στην συνολική ημερήσια αποφόρτιση του υδατοφορέα. Ο παραλληλόγραμμος υδατοφορέας $\mathcal{R}$ εκτείνεται σε επιφάνεια 7×3 Km, είναι *ετερογενής* ως προς την υδραυλική του διαπερατότητα και περιλαμβάνει M πηγάδια w_i $(i = 1, \ldots, M)$ τα οποία αντλούν με ρυθμούς Q_i (m^3/day). Στο πρόβλημά μας οι παραπάνω φυσικές παράμετροι τίθενται στις τιμές $N = 0.03\ m/year$, $M = 5$ and $Q_1 = 252\ m^3/day$, $Q_2 = 450\ m^3/day$, $Q_3 = 749\ m^3/day$, $Q_4 = 1045\ m^3/day$ and $Q_5 = 1270\ m^3/day$, ενώ η υδραυλική διαπερατότητα K λαμβάνει τιμές $K_1 = 25\ m/day$, $K_2 = 35\ m/day$, $K_3 = 50\ m/day$ and $K_4 = 75\ m/day$ στις 4 υποπεριοχές του $\mathcal{R}$ (Εικόνα 12). Επιπλέον, ο συνολικός ρυθμός αποφόρτισης Q λαμβάνει την τιμή

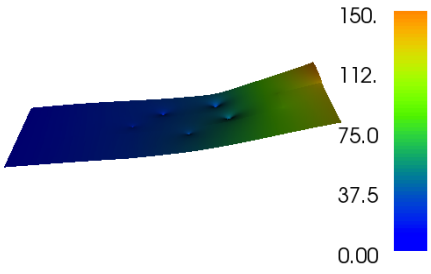
$$Q = \sum_{i=1}^{5} \tilde{Q}_i \delta(x - x_i, y - y_i)$$

όπου $\tilde{Q}_i$ αντιστοιχεί στο ρυθμό άντλησης Q_i κανονικοποιημένο σε σχέση με κάποια στοιχειώδη επιφάνεια και $\delta(x - x_i, y - y_i)$ δηλώνει τη συνάρτηση Delta. Τέλος, θεωρούμε συνοριακή συνθήκη Dirichlet $(\phi(0, y) = 0)$ στο αριστερό (παράκτιο) σύνορο, ενώ σε όλα τα άλλα σύνορα τίθενται συνοριακές συνθήκες Neumann όπως φαίνεται στην Εικόνα 12.

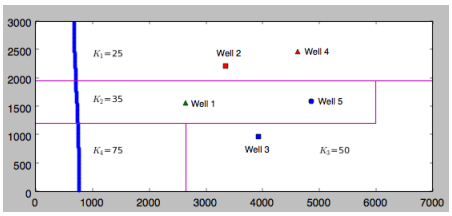
Το δυναμικό ροής που υπολογίσθηκε για το παραπάνω πρόβλημα με χρήση της υλοποίησης του αλγορίθμου Schwarz στο FEniCS απεικονίζεται στην Εικόνα 13(α΄). Ακολούθως, καθορίστηκε αλγοριθμικά το όριο μεταξύ αλμυρού και γλυκού νερού όπως φαίνεται στην Εικονα 13(β΄).

Το πρόβλημα χωρίζεται φυσιολογικά σε 4 υποπροβλήματα, λόγω του διαφορετικού τελεστή PDE (διαφορετικά Q και K στην εξίσωση PDE equation 1).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(α΄) Υπολογισθέν δυναμικό ροής.



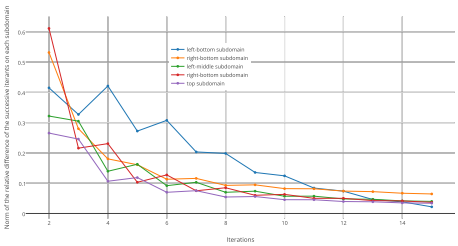
(β΄) Όριο μεταξύ γλυκού και αλμυρού νερού.

Εικόνα 13: Υπολογισθείσες λύσεις για τον υδατοφορέα Καλύμνου.

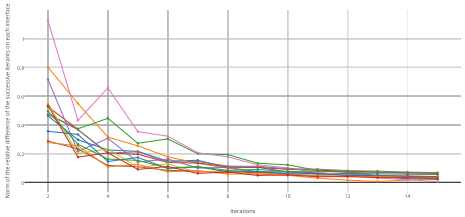
Τα υποπροβλήματα διακρίνονται στην Εικόνα 12. Χωρίζουμε επιπλέον το κάτω δεξιά χωρίο σε 2 υποχωρία για λόγους γεωμετρικής ευκολίας (ώστε να αντιμετωπίζουμε μόνο παραλληλόγραμμα υποχωρία). Έτσι, αντιμετωπίζουμε ένα σύνολο 5 υποπροβλημάτων.

Προκειμένου να είναι δυνατή η χρήση της μεθόδου Schwarz, θεωρούμε επικάλυψη του 2ου υποχωρίου (με υδραυλική διαπερατότητα K_2) με τα γειτονικά του. Η επιφάνειά του εκτείνεται οριζόντια κατά 400 μ μέσα στα γειτονικά υποχωρία. Επιπλέον, θεωρούμε επικαλυπτόμενη περιοχή του 4ου υποχωρίου μέσα στο 3ο βάθους 400 μ. Η ζώνη 1400 μ που περιλαμβάνει το πηγάδι 3 στο 2ο υποχωρίο επιλέγεται ως περιοχή επικάλυψης με το 3ο υποχωρίο. Ως αποτέλεσμα υπάρχουν 14 διεπαφές μεταξύ των 5 υποχωρίων.

Όπως φαίνεται καθαρά από τις Εικόνες 14(β΄) και 14(α΄) η μέθοδος συγκλίνει μάλλον γρήγορα, παρά την ύπαρξη 5 υποχωρίων και 14 διεπαφών μεταξύ τους.



(α΄) Ρυθμός σύγκλισης μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων για τα υποπροβλήματα.



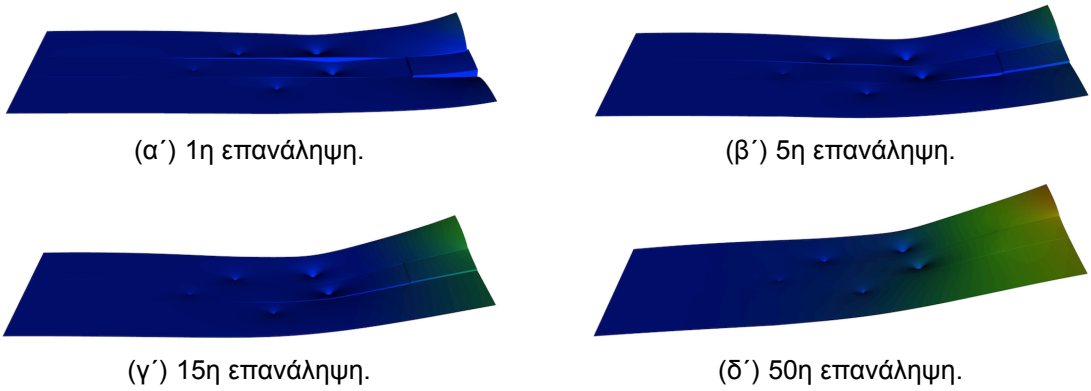
(β΄) Ρυθμός σύγκλισης μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων για τις 14 διεπαφές.

Εικόνα 14: Ρυθμός σύγκλισης μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων της μεθόδου.

Η φύση της σύγκλισης απεικονίζεται και στην Εικόνα 15. Οι όροι σφάλματος υψηλής συχνότητας εξαλείφονται σύντομα (κατά τη διάρκεια των πρώτων λίγων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επαναλήψεων) και η λύση εξομαλύνεται επιπλέον στις μετέπειτα επαναλήψεις.



(α΄) 1η επανάληψη. (β΄) 5η επανάληψη.

(γ΄) 15η επανάληψη. (δ΄) 50η επανάληψη.

Εικόνα 15: Η υπολογισθείσα συνολική λύση μετά από 1, 2, 15 και 50 επαναλήψεις.

3.1.2 Υβριδική Αιτιοκρατική/Στοχαστική Μέθοδος για Προβλήματα MDMP

Ο κώδικας 6 επιδεικνύει τη χρήση της αιτιοκρατικής / στοχαστικής μεθόδου που υλοποιήθηκε στο FEniCS για τη λύση μιας PDE σε ένα εσωτερικό, τετράγωνο υποχωρίο ενός μεγαλύτερου χωρίου. Πριν τη λύση στο υποχωρίο εκτιμώνται, με στοχαστικό τρόπο, οι τιμές στη διεπαφή του εσωτερικού υποχωρίου. Οι αλλαγές που εισάγονται από τις επεκτάσεις μας διακρίνονται, και πάλι, με χρήση έντονων χαρακτήρων.

Κώδικας 6: Παράδειγμα χρήσης της μεθόδου montecarlo().

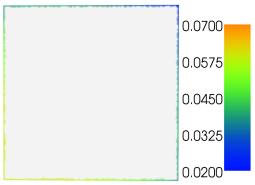
```
1  from dolfin import *
2  import hybridmc as hmc  # the platform's Python module
3
4  def onbc(x,on_boundary):
5      return on_boundary
6
7  def mc_test_2D(Omega, Subdomain):
8      x, y = variable(Expression("x[0]")),
9             variable(Expression("x[1]"))
10     expr = (x)*(x-1)*(y)*(y-1)
11
12     mesh = Mesh(SubDomain,128)
13     V = FunctionSpace(mesh,'Lagrange',1)
14
15     u, v = TrialFunction(V), TestFunction(V)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

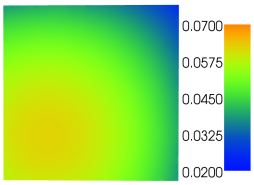
```
16      f = -Laplacian(expr,x,y)
17      a = inner(grad(u), grad(v))*dx
18      L = f*v*dx
19
20      # get expressions as strings
21      f_expr, q_expr = hmc.tools.cppcode(expr,x,y),
22                       hmc.tools.cppcode(f,x,y)
23      mcbc, est = client.montecarlo(V, onbc, OpenCL=True, Omega=Omega,
24                                    f=f_expr, q=q_expr)
25      sol_mc = Function(V)
26      solve(a==L,sol_mc,[ mcbc ])
27
28  if __name__ == '__main__':
29      Omega2D = [ 1., 1. ]
30      SubDomain2D = Rectangle(.4, .8, .4, .8)
31      client = hmc.LocalClient()
32      mc_test_2D(Omega2D, Subdomain2D)
```

Το αντικείμενο `client` στη γραμμή 29 αναδεικνύει τη δυνατότητα τοπικής ή απομακρυσμένης υλοποίησης της μεθόδου.

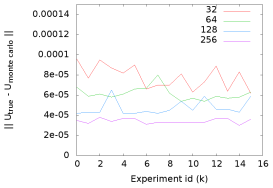
Η Εικόνα 16 περιλαμβάνει την εκτίμηση της στοχαστικής μεθόδου για τις τιμές στη διεπαφή του εσωτερικού υποχωρίου, τη λύση που επιτεύχθηκε από την υβριδική αιτιοκρατική / στοχαστική μέθοδο για το πρόβλημα-μοντέλο που περιγράφεται από τον Κώδικα 6, καθώς και το απόλυτο σφάλμα σε σχέση με έναν πλήρως αιτιοκρατικό επιλυτή για ένα σύνολο 16 πειραμάτων.



(α΄) Στοχαστική εκτίμηση τιμών στη διεπαφή του εσωτερικού υποχωρίου



(β΄) Λύση στο εσωτερικό υποχωρίο από τον υβριδικό επιλυτή



(γ΄) Σφάλμα λύσης σε σχέση με πλήρως αιτοκρατικό επιλυτή. Διαφορετικές γραμμές αντιστοιχούν σε διαφορετικές πυκνότητες του υπολογιστικού πλέγματος

Εικόνα 16: Στοχαστική εκτίμηση, υβριδική λύση και σφάλμα λύσης σε σχέση με αιτιοκρατικό επιλυτή

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.1.3 Μέθοδος Geometric Contraction (GEO)

Ακολουθιακή υλοποίηση της GEO Σε αυτή την παράγραφο παρέχονται ενδεικτικά στιγμιότυπα κώδικα από την υλοποίηση της μεθόδου GEO στο FEniCS.

Οι ανανεωμένες τιμές σε ένα σημείο της διεπαφής υπολογίζονται ως εξής:

$$u^{(k+1)}(x) = u^{(k)}(x) - \rho(\frac{\partial u_L^{(k)}(x)}{\partial n} - \frac{\partial u_R^{(k)}(x)}{\partial n}), k = 1, 2, ... \quad (2)$$

που k είναι η επανάληψη, u είναι η υπολογισμένη λύση στο σημείο της διεπαφής x, $\frac{\partial u_L^{(k)}(x)}{\partial n} - \frac{\partial u_R^{(k)}(x)}{\partial n}$ είναι οι τιμές των προς τα έξω κανονικών παραγώγων στα δύο γειτονικά υποπεδία και ρ είναι η παράμετρος χαλάρωσης που χρησιμοποιείται για να επιταχύνει τη σύγκλιση. Μια νέα επανάληψη ξεκινάει με το που περαστούν οι χαλαρωμένες τιμές των διεπαφών πίσω στα υπο-πεδία.

Πιο αναλυτικά, τμήματα του FEniCS προγράμματος που υλοποιεί τα παραπάνω παρουσιάζεται στη συνέχεια. Αρχικά γίνεται η δημιουργία των υποπεδίων. Ενδεικτικά παρουσιάζουμε τη δημιουργία του αριστερού υπο-πεδίου για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για την περίπτωση, όπου $h = 0.5$.

```
1 meshdown = RectangleMesh(0, 0, 0.3333, 2, 7, 40, 'left')
2 Vdown = FunctionSpace(meshdown, 'Lagrange', 1)
```

Στη συνέχεια ορίζουμε τις οριακές συνθήκες και τις συνθήκες των διεπαφών. Ενδεικτικά, η πρώτη (αριστερή) διεπαφή:

```
1 int1_expr = Expression('4135.5*x[1]-6077.6')
2 class Interface1(SubDomain):
3         def inside(self, x, on_boundary):
4                 return on_boundary and abs(x[0] - 0.3333) < tol
5                         and abs(x[1] - 2) > tol
6                         and abs(x[1] - 1.5) > tol
7 Gamma_4_left = DirichletBC(Vdown, int1_expr, Interface1())
```

Ακολουθεί ο ορισμός του παραμετρικού προβλήματος. Πάλι για το αριστερό υπο-πεδίο του ομοιόμορφου προβλήματος:

```
1 u = TrialFunction(Vdown)
2 v = TestFunction(Vdown)
3 f = interpolate(f_expr, Vdown)
4 a = (inner(nabla_grad(u), nabla_grad(v))+g2*inner(u, v))*dx
5 L = f*v*dx
```

Και στη συνέχεια ο υπολογισμός της λύσης:

```
1 u = Function(Vdown)
2 solve(a == L, u, bcsdown)
```

Και της παραγώγου:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
V_g = VectorFunctionSpace(meshdown, 'Lagrange', 1)
v = TestFunction(V_g)
w = TrialFunction(V_g)
a = inner(w, v)*dx
L = inner(grad(u), v)*dx
grad_u = Function(V_g)
solve(a == L, grad_u)
```

Παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο λαμβάνουμε τις τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών:

```
vertex_to_dof_map = Vdown.dofmap().vertex_to_dof_map(meshdown)
dof_to_vertex_map = Vdown.dofmap().dof_to_vertex_map(meshdown)
m = u.vector()
dofs_at_vertices = m[dof_to_vertex_map]
coor = meshdown.coordinates()

grad_u_x, grad_u_y = grad_u.split(deepcopy=True)

for vdown in vertices(meshdown):
        ldown = coor[vdown.index()]
                ldown[0], ldown[1],
                dofs_at_vertices[vdown.index()],
                dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()],
                dofs_at_vertices_g_y_down[vdown.index()]]
```

Και ακολουθεί ο τρόπος που τις επαναθέτουμε, αφού τις επεξεργαστούμε:

```
downbound=(dofs_at_vertices[vdown.index()]+
           dofs_at_vertices_up[vup.index()])/2+
           omega*(-dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()]+
           dofs_at_vertices_g_x_up[vup.index()])

upbound=(dofs_at_vertices[vdown.index()]+
         dofs_at_vertices_up[vup.index()])/2+
         omega*(-dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()]+
         dofs_at_vertices_g_x_up[vup.index()])

u.vector().set_local(dofs_at_vertices.array()[vertex_to_dof_map])
downbound=Function(Vdown)
downbound.assign(u)
```

Παράλληλη υλοποίηση της GEO Ενδεικτικά τμήματα του κώδικα της παράλληλης υλοποίησης της GEO, δίνονται παρακάτω.

Ο client αρχικοποιεί την επικοινωνία:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
def __init__(self):
        self.credentials = pika.PlainCredentials('test', 'test')
        self.connection = pika.BlockingConnection(
                pika.ConnectionParameters('150.140.139.89',5672,
                                          '/',
                                          self.credentials))
        self.channel = self.connection.channel()
        result=self.channel.queue_declare(exclusive=True)
        self.callback_queue = result.method.queue
        self.channel.basic_consume(self.on_response, no_ack=True,
                                   queue=self.callback_queue)
        self.connection2= pika.BlockingConnection(
                pika.ConnectionParameters('150.140.139.89',
                                          5672,
                                          '/',
                                          self.credentials))
        self.channel2 = self.connection2.channel()
        result2=self.channel2.queue_declare(exclusive=True)
        self.callback_queue2 = result2.method.queue
        self.channel2.basic_consume(self.on_response,
                                    no_ack=True,
                                    queue=self.callback_queue2)
```

Περιμένει τις απαντήσεις από τους servers:

```
def on_response(self, ch, method, props, body):
  #print "on_response result ch=%s guess=%s" % (ch,self.channel)
    if ch == self.channel:
      self.response = body
    else:
      self.response2 = body
```

Αφού πρώτα τους στείλει τις τιμές στις διεπαφές που υπολόγισε επιλύοντας το πρόβλημα στην εκάστοτε επανάληψη:

```
self.response = None
self.corr_id = str(uuid.uuid4())
self.channel.basic_publish(
   exchange='',
   routing_key='hello',
   properties=pika.BasicProperties(
                    reply_to = self.callback_queue,
                    correlation_id = self.corr_id),
   body=inter2)
```

Αντίστοιχα ο κάθε server επιλύει το πρόβλημά του, λαμβάνει από τον client

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

τη λύση και την παράγωγο που υπολόγισε στη διεπαφή και υπολογίζει τις καινούργιες τιμές στη διεπαφή:

```
1 response=(interfaceup+interfaced)/2+
2           omega*(-gradientd+gradientup)
```

Το αποτέλεσμα αυτό το χρησιμοποιεί για την επόμενη επανάληψή του. Το στέλνει, όμως και στον client για να προχωρήσει και αυτός με την επόμενη επανάληψη του.

```
1 ch.basic_publish(exchange='',
2     routing_key=props.reply_to,
3     properties=pika.BasicProperties(correlation_id =
4                                     props.correlation_id),
5     body=json.dumps(response.tolist()))
6 ch.basic_ack(delivery_tag = method.delivery_tag)
```

3.2 Χρήση Σύγχρονων Τεχνολογιών Υλικού για την Επίλυση Μεγάλων Αραιών Γραμμικών Συστημάτων

3.2.1 Τεχνολογίες Δευτερεύουσας Μνήμης και Αλγοριθμοι Out-of-Core

Τα πειράματα πραγματοποιήθηκαν σε δύο σταθμούς εργασίας DELL Precision T3500 με 8GB of DDR3 RAM και έναν τετρα-πύρηνο Intel Xeon W3550 3.06GHz το καθένα. Ο πρώτος σταθμός εργασίας διαθέτει έναν οδηγό SSD Intel 520 240GB, SATA-III, και έναν οδηγό OCZ Revodrive 350 PCIe 480GB ως επιπλέον αποθηκευτικό μέσο. Ο δεύτερος σταθμός εργασίας διαθέτει έναν σκληρό Seagate Barracuda 7200rpm 1TB. Και οι δύο σταθμοί χρησιμοποιούν Centos 6.5 με kernel 2.6.32-431.el6.x86_64 για λειτουργικό σύστημα και έχουν διαμορφωθεί ώστε να χρησιμοποιούν μέχρι 8GB swap.

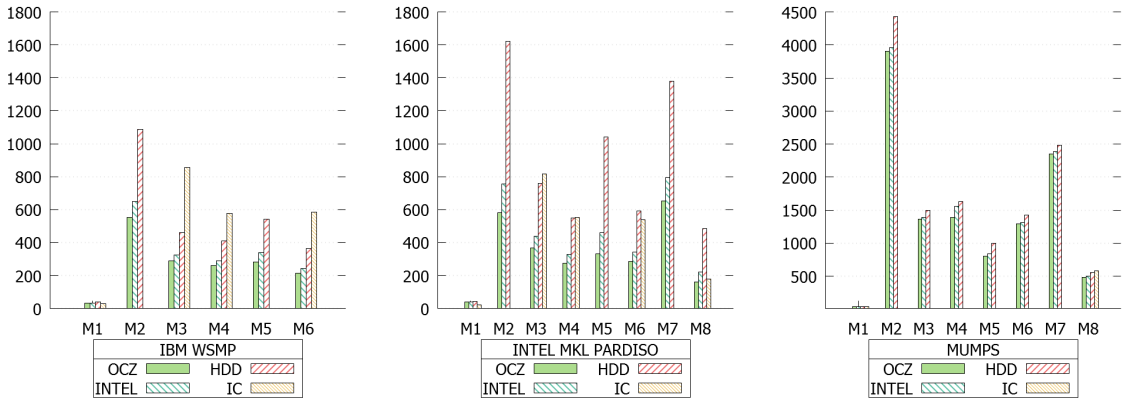
Οι αραιοί πίνακες που χρησιμοποιηθήκαν στα πειράματα προέρχονται από τις συλλογές, του Πανεπιστημίου της Φλόριντα[2] και του ερευνητικού προγράμματος GRID-TLSE[3]. Οι ιδιότητές των αραιών πινάκων συνοψίζονται στον Πίνακα 1.

MATRIX		TYPE	$N(A)$	$NNZ(A)$	DESCRIPTION
INLINE_1	M1	RSPD	5.04E+05	1,87E+07	Structural
ASTER_PERF011A	M2	RSI	8,54E+05	7,11E+07	Structural engineering
AUDIKW_1	M3	RSI	9,44E+05	3,93E+07	Automotive model
NICE20MC	M4	RSI	7,16E+05	2,81E+07	Earthquake analysis
FLAN_1565	M5	RSPD	1,56E+06	1,14E+08	Structural
STOCF_1465	M6	RSPD	1,47E+06	2,10E+07	Fluid dynamics
ATMOSMODL	M7	RUI	1,49E+06	1,03E+07	Atmospheric modeling
ASTER_PERF002C	M8	RSI	1,0E+6	3,79E+07	Structural engineering

[2]http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/

[3]http://gridtlse.enseeiht.fr/

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 17: Χρόνοι επίλυσης στη RAM σε HDD και flash SSD

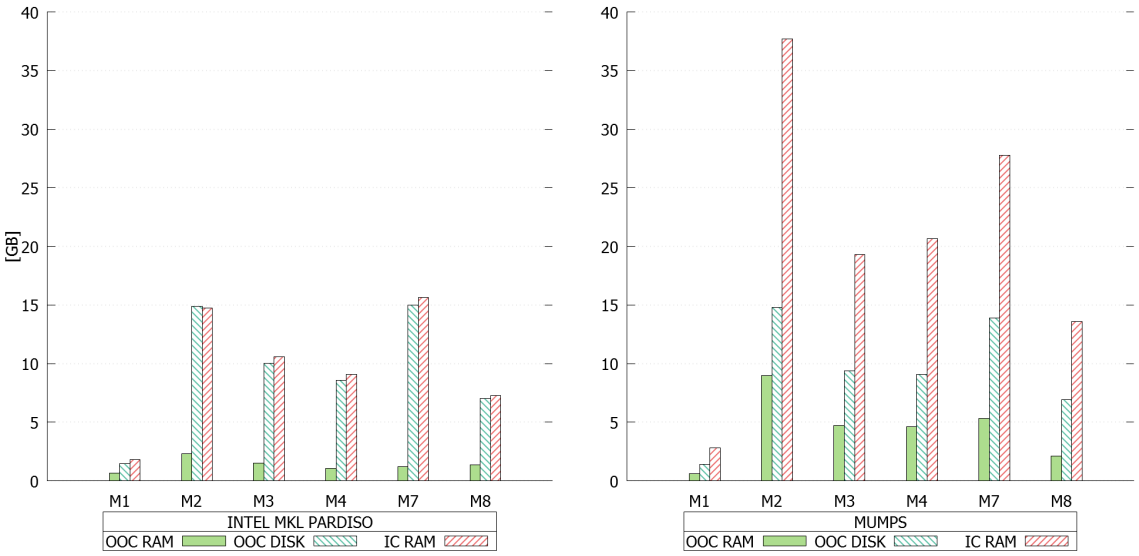
Πίνακας 1: Αραιοί Πίνακες

Για την επίλυση των συστημάτων στην κύρια μνήμη (in-core) χρησιμοποιήθηκε ο σταθμός εργασίας με τους δίσκους στερεάς κατάστασης. Στην Εικόνα 17 παρουσιάζονται οι χρόνοι επίλυσης (wall-clock time) για τα τρία πακέτα λογισμικού.

Σε όλες σχεδόν τις περιπτώσεις η χρήση της flash οδηγεί σε σημαντική μείωση του χρόνου επίλυσης των συστημάτων σε σχέση με τον μαγνητικό δίσκο. Στο PARDISO, η επίλυση στην flash είναι δύο με τρεις φορές γρηγορότερη απ' ότι στον σκληρό δίσκο, στο WSMP ως και δύο φορές ταχύτερη, ενώ μικρότερη είναι η διαφορά στο MUMPS, αλλά παραμένει σημαντική. Σε όλες τις περιπτώσεις η επιτάχυνση είναι μικρότερη για το σύστημα M1, καθώς το μικρό του μέγεθός του ελαχιστοποιεί την πρόσβαση στην εξωτερική μνήμη. Η επίλυση στην κύρια μνήμη είναι γρηγορότερη εφόσον το μέγεθος την μνήμης που απαιτείται δεν υπερβαίνει την διαθέσιμη RAM, διαφορετικά χρησιμοποιείται εικονική μνήμη (swap) και η επίλυση καθυστερεί σημαντικά (π.χ. περίπτωση M3 & M4 στο WSMP και PARDISO). Στην περίπτωση δε, που η απαιτούμενη μνήμη υπερβαίνει το άθροισμα κύριας και εικονικής μνήμης δεν είναι δυνατή η επίλυση του συστήματος, για παράδειγμα μόνο τα συστήματα M1 και M8 κατέστη δυνατό να επιλυθούν με το MUMPS στην κύρια μνήμη. Οι απαιτήσεις σε κύρια και δευτερεύουσα μνήμη για το PARDISO και το MUMPS παρουσιάζονται στην Εικόνα 18, για το WSMP δεν ήταν δυνατό να έχουμε άμεσα συγκρίσιμες πληροφορίες.

Συνοψίζοντας, τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η επίλυση μεγάλων αραιών συστημάτων γραμμικών εξισώσεων μπορεί να ωφεληθεί σημαντικά από την αξιοποίηση νέων τεχνολογιών, όπως οι μνήμες flash. Ωστόσο, είναι αναγκαία η περαιτέρω μελέτη των αλγορίθμων εξωτερικής μνήμης με σκοπό την βελτιστοποίησή τους γι' αυτό το νέο μέσο. Επιπλέον, τα πειράματα δείχνουν ότι η αποδοτική

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 18: Απαιτήσεις σε κύρια και δευτερεύουσα μνήμη

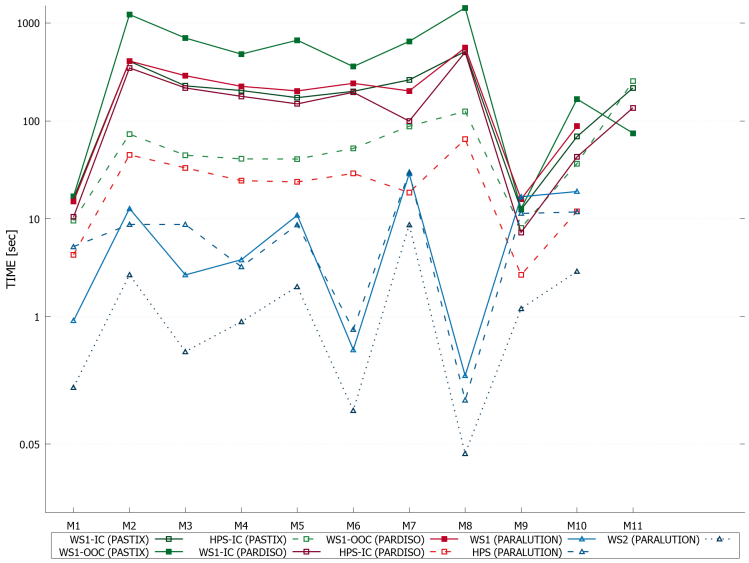
επίλυση ενός αραιού συστήματος απαιτεί την προσεκτική επιλογή του κατάλληλου αλγορίθμου (in-core/out-of-core) ανάλογα με το διαθέσιμο υλικό (hardware).

3.2.2 Σύγχρονες Πλατφόρμες Υλικού και Αραιά Γραμμικά Συστημάτα

Η οποιαδήποτε εξέλιξη στην τεχνολογία των Η/Υ μπορεί να επηρεάσει την επίλυση μεγάλων αραιών συστημάτων γραμμικών εξισώσεων. Εκτελέσαμε μια σειρά πειραμάτων, χρησιμοποιώντας τόσο άμεσες όσο και επαναληπτικές μεθόδους σε διαφορετικές πλατφόρμες σύγχρονου υλικού προκειμένου να ανιχνεύσουμε τα όρια και τις δυνατότητες κάθε συνδυασμού μεθόδου/υλικού. Τα πειράματα που αφορούν τις άμεσες μεθόδους τα πραγματοποιήσαμε με τα πακέτα: PASTIX [16] του INRIA και την έκδοση του PARDISO που περιλαμβάνεται στην INTEL MKL. Αντίστοιχα για τις επαναληπτικές μεθόδους χρησιμοποιήσαμε την βιβλιοθήκη PARALUTION [20].

Τα πειράματα πραγματοποιήθηκαν σε, α) ένα σταθμό εργασίας εξοπλισμένο με οδηγούς SSD (WS1), β) ένα σταθμό εργασίας με GPU (WS2) και γ) ένα εξυπηρετητή με δύο 18-core επεξεργαστές (HPS). Συγκεκριμένα ο σταθμός WS1 είναι ένα DELL Precision T3500 με 24GB DDR3 RAM, έναν 4-πύρηνο Intel Xeon W3550 3.06GHz. Διαθέτει έναν οδηγό SSD Intel 520 240GB SATA-III για το λειτουργικό σύστημα, έναν οδηγό OCZ Revodrive 350 PCIe 480GB και έναν SSD Intel 530 240GB ως επιπλέον αποθηκευτικά μέσα. Στα πειράματα χρησιμοποιήθηκε ο OCZ λόγω των καλύτερων επιδόσεών του. Ο δεύτερος σταθμός εργασίας είναι ένα DELL T5500 με 24GB DDR3 RAM, έναν επεξεργαστή 6-core Intel Xeon E5645 2,4GHz και μία Tesla C2075 GPU. Τέλος ο εξυπηρετητής είναι ένας HP

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 19: Χρόνοι εκτέλεσης

BL460c Gen 9 blade server με 64GB DDR4 RAM και 2 επεξεργαστές Intel Xeon CPUs E5-2695 v3 στα 2.30GHz με 14 cores ο καθένας.

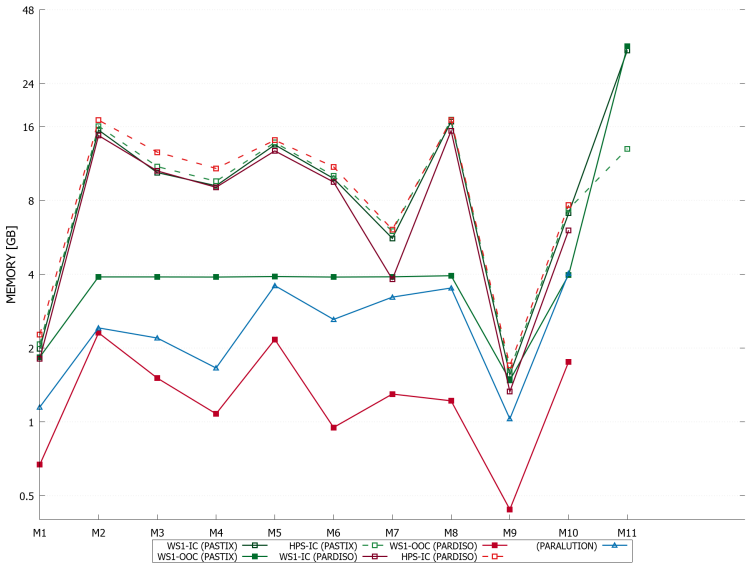
ID	**NAME**	**TYPE**	$N(A)$	$NNZ(A)$
M1	Inline_1	R, S, PD	5,04E+05	1,87E+07
M2	Aster_perf-11a	R, S, I	8,54E+05	7,11E+07
M3	Audikw_1	R, S, I	9,44E+05	3,93E+07
M4	Nice20mc	R, S, I	7,16E+05	2,81E+07
M5	Flan_1565	R, S, PD	1,56E+06	1,14E+08
M6	StocF_1465	R, S, PD	1,47E+06	2,10E+07
M7	kkt_power	R,S	2,06E+06	1,28E+07
M8	Atmosmodl	R, U, I	1,49E+06	1,03E+07
M9	StepDHC_DIRK_1	R, U	4,10E+05	6,53E+06
M10	StepDHC_DIRK_2	R, U	1,64E+06	2,62E+07
M11	StepDHC_DIRK_3	R, U	6,55E+06	1,05E+08

Πίνακας 2: Αραιοί Πίνακες

Για τις ανάγκες των πειραμάτων χρησιμοποιήθηκαν συμμετρικοί και μη συμμετρικοί πίνακες. Οι αραιοί πίνακες M1-M8 προέρχονται από την συλλογή του Πανεπιστημίου της Φλόριντα, ενώ οι πίνακες M9-M11 προέρχονται από την διακριτοποίηση παραβολικών προβλημάτων πολλαπλών πεδίων και παρήχθησαν στα πλαίσια του έργου [6] [7]. Οι ιδιότητές των αραιών συστημάτων συνοψίζονται στον Πίνακα 2.

Σε κάθε πείραμα μετρήθηκαν οι χρόνοι εκτέλεσης και οι απαιτήσεις σε μνήμη. Τα πειράματα που αφορούν τις άμεσες μεθόδους εκτελέστηκαν στο σταθμό ερ-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 20: Απαιτήσεις σε κύρια μνήμη

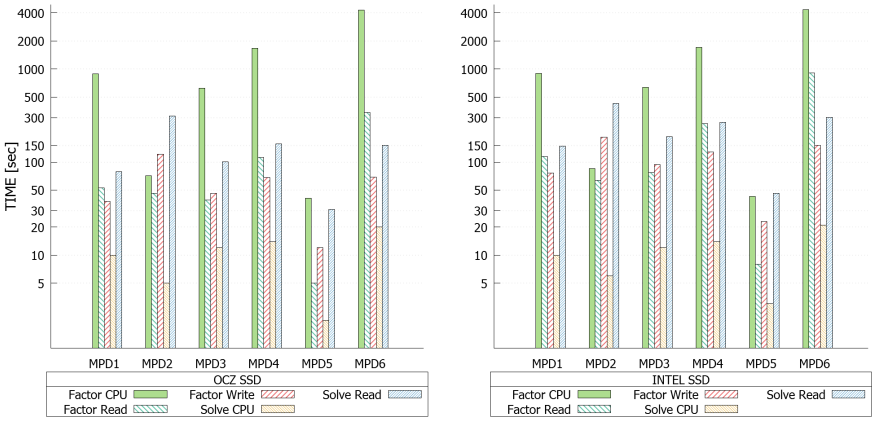
γασίας WS1 και στον εξυπηρετητή HPS. Δεν κατέστη δυνατή η επίλυση των περισσότερων συστημάτων με άμεσες μεθόδους στην GPU, εξαιτίας την περιορισμένης μνήμης της (μόνο τα συστήματα M1 και M9 επιλύθηκαν). Από την άλλη μεριά, οι επαναληπτικοί αλγόριθμοι εκτελέστηκαν και στις τρεις πλατφόρμες με επιτυχία. Η γραφική απεικόνιση των χρόνων εκτέλεσης παρουσιάζεται στην Εικόνα 19, αντίστοιχα οι απαιτήσεις σε μνήμη στην Εικόνα 20.

Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι οι επαναληπτικές μέθοδοι υπερτερούν των άμεσων στις περισσότερες περιπτώσεις και έχουν την δυνατότητα να εκμεταλλεύονται αποδοτικότερα την επεξεργαστική ισχύ των σύγχρονων GPUs, αφού απαιτούν λιγότερη μνήμη. Σε ορισμένες περιπτώσεις στον εξυπηρετητή HPS οι άμεσες μέθοδοι δίνουν αποτελέσματα ταχύτερα από τις επαναληπτικές. Τέλος οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν εξωτερική μνήμη σε συνδυασμό με νέες τεχνολογίες μνημών φαίνεται να αποτελούν ενδιαφέρουσα εναλλακτική για τις άμεσες μεθόδους όταν η κύρια μνήμη δεν επαρκεί.

3.2.3 Αλγόριθμοι Εξωτερικής Μνήμης για Μνήμες Τύπου Flash

ID	NAME	$N(A)$	$NNZ(A)$	$NNZ(L)$	W_{FACT}	R_{FACT}	R_{SOLVE}
MPD1	audikw_1	9.44E+02	7.77E+07	1.25e+09	11,3GB	19,7GB	22,6GB
MPD2	ecology2	1.00E+03	4.996E+06	3.62e+07	9,05GB	3,1GB	18,1GB
MPD3	Flan_1565	1.14E+08	1.56E+06	1.48e+09	13,7GB	12,4GB	27,5GB
MPD4	Hook_1498	1.50E+06	5.94E+07	1.61e+09	15,8GB	45,7GB	31,6GB
MPD5	INLINE_1	5.04E+02	3.68E+07	1.61e+09	2,04GB	0,7GB	4,1GB
MPD6	Serena	1.39E+06	6.41E+07	2.74e+09	23,5GB	177,9GB	46,9GB

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 21: Αρχικό κόστος

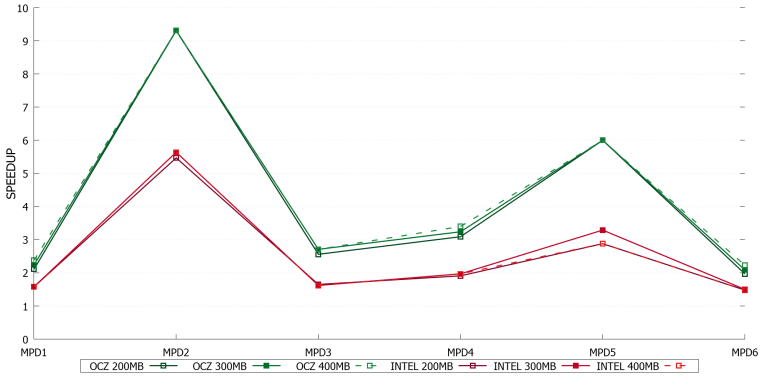
Πίνακας 3: Συμμετρικοί και θετικά ορισμένοι πίνακες

Βασιζόμενοι στα προηγούμενα συμπεράσματα μελετήσαμε τις δυνατότητες βελτίωσης της απόδοσης των αλγορίθμων εξωτερικής μνήμης στην flash και πιο συγκεκριμένα την υλοποίηση της μεθόδου Cholesky που περιλαμβάνεται στο TAUCS. Οι αραιοί πίνακες που χρησιμοποιήθηκαν στα πειράματα παρουσιάζονται στον Πίνακα 3. Τα πειράματα εκτελέστηκαν στον σταθμό εργασίας WS1, (που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο), σε δύο διαφορετικούς οδηγούς SSD: έναν υψηλών επιδόσεων (OCZ Revodrive 350, PCI Express) και έναν μικρότερου κόστους και επιδόσεων (Intel 530 SSD, SATA III). Χρησιμοποιήθηκε DIRECT_IO για να μετρηθεί το πραγματικό κόστος της ανάγνωσης/εγγραφής (I/O) αποφεύγοντας την page cache του λειτουργικού συστήματος. Οι χρόνοι εκτέλεσης του αρχικού αλγορίθμου σε κάθε δίσκο, (χωρίς καμιά τροποποίηση), παρουσιάζονται στην Εικόνα 21.

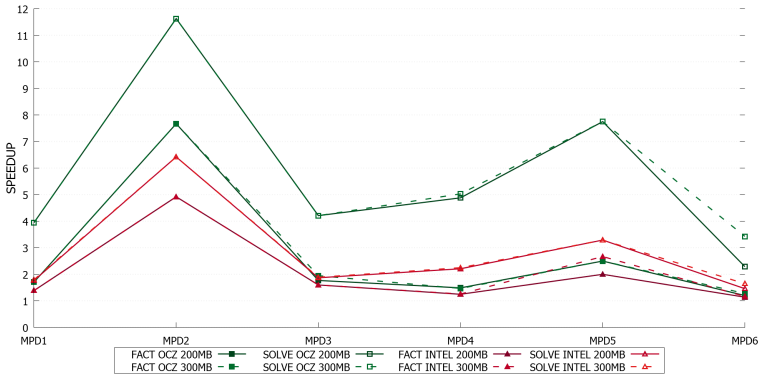
Ο αλγόριθμος εξωτερικής μνήμης του TAUCS (out-of-core) αποθηκεύει τα στοιχεία του πίνακα της παραγοντοποίησης καθώς και βοηθητικές δομές σε ένα ή περισσότερα αρχεία στην δευτερεύουσα μνήμη. Η προσθήκη νέων δεδομένων γίνεται πάντα στο τέλος του αρχείου (append only) και δεν επιτρέπονται οι μεταβολές τους (in-place updates) μετά την εγγραφή. Η διαδικασία αυτή είναι αρκετά αποδοτική για την flash [27], ωστόσο παρατηρήσαμε ότι πραγματοποιείται ένας μεγάλος αριθμός των εγγραφών (writes), πολλές από τις οποίες έχουν μικρό μέγεθος. Προκειμένου να βελτιώσουμε την ταχύτητα εγγραφής στην flash, εισαγάγαμε έναν write buffer για την μαζική εκτέλεση εγγραφών (batch writes) και εκτελέσαμε πειράματα για διαφορετικά μεγέθη του buffer. Η επιτάχυνση (speedup) που επετεύχθη για κάθε SSD παρουσιάζεται στην Εικόνα 22.

Η βελτίωση της απόδοσης της ανάκτησης (read) των αποθηκευμένων στοιχείων απαιτεί μεγαλύτερη παρέμβαση στον αλγόριθμο τόσο της παραγοντοποίη-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 22: Επιτάχυνση εγγραφής, με χρήση write buffer



Εικόνα 23: Επιτάχυνση ανάγνωσης, με χρήση read buffer και prefetching

σης (factorization) όσο και της επίλυσης (forward elimination & back substitution). Στο στάδιο της παραγοντοποίησης μειώσαμε τον αριθμό των λειτουργιών ανάγνωσης (read operations) των αποθηκευμένων βοηθητικών δομών (π.χ. supernode structure). Συγκεκριμένα χρησιμοποιήσαμε έναν read buffer και αξιοποιήσαμε το δέντρο απαλοιφής για να υλοποιήσουμε ένα μηχανισμό προ-ανάκτησης (prefetching) στα διάφορα στάδια της παραγοντοποίησης. Στο δε, στάδιο της επίλυσης χρησιμοποιήσαμε την ίδια μεθοδολογία όχι μόνο για την ανάκτηση των βοηθητικών δομών αλλά και για την ανάκτηση του πίνακα της παραγοντοποίησης. Η επιτάχυνση που μετρήσαμε σε κάθε περίπτωση, και για κάθε οδηγό, εμφανίζεται στην Εικόνα 23.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.3 Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Υποδομής Cloud

3.3.1 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Web Services

Σε αυτή την παράγραφο παρουσιάζουμε, ως παράδειγμα χρήσης web services για την αξιοποίηση υποδομής cloud, την υλοποίηση της υβριδικής αιτιοκρατικής / στοχαστικής μεθόδου για προβλήματα MDMP. Για την υλοποίηση έχουμε επιλέξει να αξιοποιήσουμε το Spyne [23], ένα από τα πολλά frameworks για την υποστήριξη cloud computing σε Python. Παρακάτω παρουσιάζουμε συνοπτικά τα κύρια βήματα.

Κώδικας 7: Ορισμός μιας απλής server function

```
1  from spyne import Application, rpc, ServiceBase, Integer,
2                   Double, Array
3  from spyne.protocol.soap import Soap11
4  import _hybridmc as core
5  import numpy as np
6
7  class MDMPService(ServiceBase):
8  """1. convert the input Python lists to numpy arrays
9     2. call the core method and return output as Python list"""
10   @rpc(Array(Double),Integer,Array(Double),Integer,
11        String,String,Boolean,
12        _returns=Array(Double))
13   def montecarlo(ctx, dims, dim, coords, nof_nodes,f,q,OpenCL):
14       D = np.array(dims, dtype=np.float_)
15       node_coord = np.array(coords, dtype=np.float_)
16       if not OpenCL:
17         f = Expression(f)
18         q = Expression(q)
19       return core.montecarlo(D,dim,node_coord,nof_nodes,f,q)
```

Ο Κώδικας 7 δείχνει την υλοποίηση μιας απλής server function που λειτουργεί ως περιτύλιγμα (wrapper) της υλοποίησης της υβριδικής μεθόδου (`montecarlo()`). Η ενεργοποίηση του server μπορεί να γίνει όπως φαίνεται στον Κώδικα 8. Ο server, στη συγκεκριμένη περίπτωση, ενεργοποιείται στο τοπικό μηχάνημα στο port 8000.

Κώδικας 8: Ενεργοποίηση server.

```
1  from spyne import Application
2  from spyne.server.wsgi import WsgiApplication
3  from wsgiref.simple_server import make_server
4  from mdmp_service import MDMPService
5  import logging
6
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
7  app = Application([MDMPService], 'spyne.examples.hello.soap',
8                    in_protocol=Soap11(validator='lxml'),
9                    out_protocol=Soap11())
10 wsgi_app = WsgiApplication(app)
11 # logging code ommited
12 server = make_server('127.0.0.1', 8000, wsgi_app).serve_forever()
```

Η κλάση `RemoteClient` χρησιμοποιεί τον Suds [12], έναν ελαφρύ client Python για web services βασισμένα σε SOAP, ο οποίος διαβάζει και ερμηνεύει αρχεία WSDL κατά το χρόνο εκτέλεσης. Αφού ερμηνεύσει το WDSL, παράγει από αυτό μια περιγραφή προς το χρήστη για τον τρόπο με τον οποίο θα πρέπει να επικοινωνήσει με τον server.

Προκειμένου να προσφερθεί ένα συνεπές API μεταξύ τοπικών και απομακρυσμένων μεθόδων, εκτός από την κλάση `RemoteClient` η πλατφόρμα ορίζει και μία κλάση `LocalClient` με τις ίδιες ακριβώς μεθόδους (για την περίπτωση που η εκτέλεση γίνεται τοπικά). Όταν χρησιμοποιείται η κλάση `RemoteClient`, τα δεδομένα εισόδου στέλνονται στον απομακρυσμένο server, ο οποίος απαντά επιστρέφοντας τα αποτελέσματα. Ο Κώδικας 9 απεικονίζει τον βασικό ορισμό των κλάσεων `RemoteClient` και `LocalClient`.

Κώδικας 9: Βασικός ορισμός κλάσεων `RemoteClient` και `LocalClient`.

```
1  from suds.client import Client
2
3  class RemoteClient(Client):
4      def __init__(self,*args,**kwargs):
5          self.is_local = False
6          Client.__init__(self,*args,**kwargs)
7
8  class LocalClient():
9      def __init__(self,*args,**kwargs):
10         self.is_local = True
```

Τυχόν διαφορές υλοποίησης μεταξύ των τοπικών και των απομακρυσμένων κλήσεων δεν είναι ορατές στον τελικό χρήστη, ο οποίος και στις δύο περιπτώσεις χρησιμοποιεί τη λειτουργικότητα και λαμβάνει τα αποτελέσματα με τον παραδοσιακό τρόπο μιας κλήσης συνάρτησης, όπως φαίνεται στον Κώδικα 10.

Κώδικας 10: Χρήση των αντικειμένων `Client` (`Local` ή `Remote`) από τον κώδικα του τελικού χρήστη.

```
1  from dolfin import *
2  import hybridmc as hmc
3
4  if use_remote_client:
5      client = hmc.RemoteClient(wsdl_url)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
6       client.set_options(timeout=90) # ...
7   else:
8       client = hmc.LocalClient()
```

3.3.2 Αξιοποίηση Υποδομής Cloud - Πλατφόρμα IRaaS

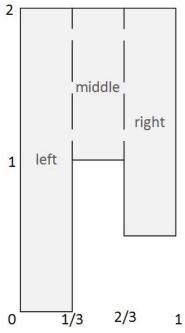
Για την αξιολόγηση της απόδοσης της προτεινόμενης εφαρμογής, χρησιμοποιήθηκε το παρακάτω ελλειπτικό πρόβλημα:

$$Lu \equiv -\nabla^2 u(x,y) + \gamma^2 u(x,y) = f(x,y) \quad (x,y) \in \Omega \tag{3}$$

$$u(x,y) = u^b(x,y) \quad (x,y) \in \partial\Omega \tag{4}$$

με $f(x,y)$ και $u(x,y)$ τέτοια ώστε η πραγματική λύση να είναι:
$u(x,y) = e^{(y(x+4)}x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5)$

Το πρόβλημα αποτελείται από τρία διαφορετικά subdomains, τα οποία απεικονίζονται στο Σχήμα 24.



Εικόνα 24: Πρόβλημα-μοντέλο με 3 υποχωρία

Τα σημεία διεπαφής είναι το $x1 = 1/3$ και $x2 = 2/3$ και η τιμή του γ είναι $\gamma^2 = 2$. Εξετάζονται εφτά διαφορετικά μεγέθη πλέγματος βάσει της παραμέτρου διακριτοποίησης h, η οποία έχει θεωρηθεί ίση τόσο στην x όσο και στην κατεύθυνση y. Ο αριθμός των σημείων των διεπαφών σε κάθε περίπτωση ισούται με τον αριθμό των σημείων της y διάστασης του μεσαίου subdomain. Αυξάνεται, δηλαδή, από τα 6 έως τα 321 σημεία. Το αριστερό subdomain είναι το μεγαλύτερο πρόβλημα από τα τρία με σημαντική διαφορά από τα υπόλοιπα (τέσσερις φορές περίπου μεγαλύτερο από το μεσαίο) ενώ το δεξί subdomain είναι περίπου δύο φορές μεγαλύτερο από το μεσαίο. Οι διεπαφές έχουν όλες ίσο αριθμό σημείων και άρα απαιτούν ίσο φόρτο εργασίας για την επεξεργασία τους. Οι περιπτώσεις που θα μελετήσουμε και τα προκύπτοντα μεγέθη του πλέγματος για το αριστερό, το μεσαίο και το δεξί subdomain, φαίνονται στον Πίνακα 4.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας 4: Εξεταζόμενες περιπτώσεις

Case	H	Left	Middle	Right
C1	0.1	4x21	4x6	4x11
C2	0.05	8x41	8x11	8x21
C3	0.025	14x81	14x21	14x41
C4	0.0125	28x161	28x41	28x81
C5	0.00625	55x321	55x81	55x161
C6	0.003125	108x641	108x161	108x321
C7	0.0015625	214x1281	214x321	214x641

Η εφαρμογή IRaaS εφαρμόστηκε και εγκαταστάθηκε σε μία μικρή ιδιωτική cloud υποδομή στις εγκαταστάσεις του εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων του τμήματος Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών. Η συγκεκριμένη υποδομή περιλαμβάνει έναν server με Intel(R) Xeon(R) CPU E3-1220@3.10GHz με 4 cores και 16GB RAM.

Οι συνδυασμοί των υπολογιστικών πόρων που χρησιμοποιήθηκαν για να παραχθεί ένας κανόνας με τον οποίο θα υπολογίζεται η κατάλληλη και αυτόματη κατανομή πόρων για κάθε διαφορετική περίπτωση του προβλήματος παρουσιάζεται στον Πίνακα 5.

Πίνακας 5: Χρησιμοποιηθέντες υπολογιστικοί πόροι

Resources	Left domain			Middle domain			Right domain		
	Cores	GHz	GB	Cores	GHz	GB	Cores	GHz	GB
R1	1	2	1	1	2	1	1	2	1
R2	1	2	2	1	2	2	1	2	2
R3	1	2	4	1	2	1	1	2	2
R4	1	2	4	1	1.5	2	1	2	2

Ο συνδυασμός R1 είναι η ελάχιστη παροχή πόρων όπου κάθε subdomain επιλύεται σε ένα εικονικό μηχάνημα που έχει επεξεργαστή με 1 core, των 2 GHz και 1 GB RAM. Στην περίπτωση R2 κάθε subdomain επιλύεται σε ένα εικονικό μηχάνημα που έχει επεξεργαστή με 1 core, των 2 GHz και 2 GB RAM. Η περίπτωση R3 είναι πιο πολύπλοκη από τις υπόλοιπες περιπτώσεις αφού το αριστερό subdomain επιλύεται σε ένα εικονικό μηχάνημα που έχει επεξεργαστή με 1 core, των 2 GHz και 4 GB RAM, το μεσαίο subdomain σε ένα εικονικό μηχάνημα που έχει επεξεργαστή με 1 core, των 2 GHz και 1 GB RAM και το δεξί subdomain επιλύεται σε ένα εικονικό μηχάνημα που έχει επεξεργαστή με 1 core, των 2 GHz και 2 GB RAM. Αυτή η περίπτωση μελετήθηκε με τέτοιο τρόπο ούτως ώστε να δούμε την ανταπόκριση του συστήματος όταν το μέγεθος της RAM είναι ανάλογο του μέγεθος του subdomain που επιλύει (μεγάλη RAM για την ει-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

κονική μηχανή που επιλύει το αριστερό subdomain που είναι το μεγαλύτερο, λίγο μικρότερη RAM για το δεξί subdomain που είναι το αμέσως μικρότερο, και την πιο μικρή RAM στο μεσαίο subdomain που είναι και το μικρότερο από όλα). Η περίπτωση R4 είναι παρόμοια με την περίπτωση R3 μόνο που εδώ δόθηκε στο εικονικό μηχάνημα που επιλύει το μεσαίο subdomain επεξεργαστής με 1 core, των 1.5 GHz και 2 GB RAM.

Ο Πίνακας 6 παρουσιάζει τους τελικούς χρόνους εκτέλεσης της μεθόδου GEO για όλες τις πιθανές περιπτώσεις συνδυασμών ανάθεσης πόρων στις εικονικές μηχανές. Κάθε τιμή του πίνακα περιλαμβάνει τον χρόνο για την επίλυση των τριών subdomains μαζί με το χρόνο για τον υπολογισμό των διεπαφών και τον χρόνο που χρειάζεται για την απαραίτητη επικοινωνία των 15 επαναλήψεων.

Πίνακας 6: Χρόνοι εκτέλεσης

Resources/Case	R1	R2	R3	R4
C1	15.041	15.082	15.016	15.042
C2	15.411	15.457	15.320	15.345
C3	15.724	15.894	15.736	15.735
C4	19.169	21.442	19.234	19.334
C5	28.548	37.271	28.669	28.470
C6	71.416	81.252	70.972	71.499
C7	500.146	307.241	297.122	298.870

Στις πρώτες 5 περιπτώσεις παρατηρείται ξεκάθαρα ότι οι χρόνοι εκτέλεσης σε κάθε περίπτωση συνδυασμού ανάθεσης πόρων είναι σχεδόν ίσοι ανεξαρτήτως των υπολογιστικών πόρων που χρησιμοποιήθηκαν. Σαν αποτέλεσμα ο συνδυασμός R1, που γίνεται η ελάχιστη ανάθεση πόρων στις εικονικές μηχανές, φαίνεται να είναι επαρκής ούτως ώστε να γίνει όσο το δυνατόν μικρότερη χρήση υπολογιστικών πόρων. Από την άλλη, στην περίπτωση C6 η πολυπλοκότητα της επίλυσης του προβλήματος μεγαλώνει και παρόλο που οι χρόνοι για κάθε περίπτωση ανάθεσης πόρων είναι σχεδόν οι ίδιοι, επιλέγεται η περίπτωση R1 που παρέχει την μικρότερη ανάθεση πόρων. Για την περίπτωση C7 του προβλήματος, ο συνδυασμός ανάθεσης πόρων R3 φαίνεται να είναι ο καταλληλότερος αφού με τη χρήση του και γίνεται μικρή ανάθεση πόρων αλλά και παρέχονται μικροί χρόνοι εκτέλεσης σε σύγκριση με όλες τις υπόλοιπες περιπτώσεις συνδυασμών ανάθεσης πόρων. Οι χρόνοι του προβλήματος C7 για τις περιπτώσεις πόρων R3 και R4 είναι σχεδόν ίδιοι, όμως επιλέγεται ως καταλληλότερη η περίπτωση R3 αφού με αυτήν γίνεται μικρότερη ανάθεση πόρων.

Με βάση τις παραπάνω παρατηρήσεις, δημιουργήθηκε για αυτά τα προβλήματα ένας κανόνας για την αυτόματη ανάθεση υπολογιστικών πόρων στις εικονικές μηχανές ανάλογα με τα δεδομένα εισόδου (περίπτωση προβλήματος C1-C7):

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Κώδικας 11: Αλγόριθμος ανάθεσης υπολογιστικών πόρων

```
1 if subdomain size <= 75000:
2     virtual solving node RAM = 1GB
3     virtual solving node processor = 1core, 2GHz
4 else if  75000 < subdomain size <= 150000:
5     virtual solving node RAM = 2GB
6     virtual solving node processor = 1core, 2GHz
7 else if subdomain size > 150000:
8     virtual solving node RAM = 4GB
9     virtual solving node processor = 1core, 2GHz
```

Όταν αυτός ο κανόνας χρησιμοποιηθεί από την ροή εργασιών, είτε η μέθοδος επίλυσης είναι η GEO είτε είναι η ROB, επιτυγχάνονται ταυτόχρονα τρεις διαφορετικοί στόχοι:

1. Ανατίθενται στις εικονικές μηχανές οι μικρότεροι δυνατοί (σε πλήθος) πόροι για την επίλυση του εκάστοτε προβλήματος,

2. Η επίλυση του προβλήματος πραγματοποιείται με το σχεδόν μικρότερο χρόνο εκτέλεσης και

3. Η ανάθεση των υπολογιστικών πόρων γίνεται στο παρασκήνιο χωρίς καμία παρέμβαση από το χρήστη.

Με τη χρήση λοιπόν του παραπάνω κανόνα, μέσω της εφαρμογής μπορεί να επιτευχθεί ο καλύτερος δυνατός συνδυασμός ανάθεσης πόρων και χρόνου εκτέλεσης. Η επίτευξη αυτού του στόχου, δηλαδή η ανάθεση του καλύτερου συνδυασμού υπολογιστικών πόρων για την επίλυση ενός προβλήματος εξαρτάται αποκλειστικά από τα δεδομένα εισόδου. Για αυτό το λόγο, η συγκεκριμένη εφαρμογή παραμετροποιήθηκε ούτως ώστε να υιοθετηθεί ο παραπάνω κανόνας.

Χρησιμοποιώντας το νέο κανόνα και εκμεταλλευόμενοι των πλεονεκτημάτων του, εκτελέστηκε για όλα τα προβλήματα εισόδου τόσο η μέθοδος GEO όσο και η μέθοδος ROB. Στον Πίνακα 7 φαίνονται οι αντίστοιχοι χρόνοι εκτέλεσης που βρέθηκαν με τη χρήση της προτεινόμενης εφαρμογής.

Στον Πίνακα 8 συγκρίνονται οι χρόνοι εκτέλεσης της IRaaS με τους αντίστοιχους χρόνους εκτέλεσης των προβλημάτων με την προηγούμενη υλοποίησή μας σε 3 διαφορετικές προκαθορισμένες εικονικές μηχανές που δεν βρίσκονταν πάνω σε κάποια cloud υποδομή. Τα εικονικά αυτά μηχανήματα ήταν τρία στο πλήθος και είχαν 4 cores και 2GB RAM το καθένα, και έτρεχαν πάνω σε έναν 2 x Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620, 2.00GHz server με εγκατεστημένο XenServer.

Παρατηρείται λοιπόν ότι η παρούσα εφαρμογή παρέχει μια σημαντική μείωση στο χρόνο εκτέλεσης (και για τις δυο μεθόδους) συγκριτικά με εκτελέσεις

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας 7: Χρόνοι εκτέλεσης με αυτόματη ανάθεση πόρων

Problem	Execution Times	
	ROB	GEO
P1	15.348	15.041
P2	15.373	15.411
P3	16.022	15.724
P4	19.223	19.169
P5	27.313	28.548
P6	65.386	71.416
P7	265.415	297.122

Πίνακας 8: Χρόνοι εκτέλεσης - Cluster / Cloud

Problem	Comparison Analysis			
	Virtual Implementation ROB	Proposed Cloud Implementation ROB	Virtual Implementation GEO	Proposed Cloud Implementation GEO
P1	16.004	15.348	15.495	15.041
P2	16.281	15.373	16.068	15.411
P3	17.392	16.022	18.140	15.724
P4	23.634	19.223	25.595	19.169
P5	45.456	27.313	51.808	19.169
P6	132.179	65.386	166.633	71.416
P7	1099.05	265.415	735.731	297.122

που πραγματοποιούνταν σε προκαθορισμένες εικονικές μηχανές που δεν άνηκαν στο cloud. Παρατηρείται επίσης ότι όσο μεγαλώνει το μέγεθος του προβλήματος, τόσο πιο σημαντική είναι η μείωση του χρόνου εκτέλεσης, γεγονός που καθιστά την εφαρμογή κατάλληλη για την ανάλυση μεγάλου όγκου δεδομένων.

Παράλληλα, η εφαρμογή παρέχει και σημαντική μείωση των υπολογιστικών πόρων που χρειάζονται για να γίνει η ίδια ακριβώς ανάλυση (βάσει του κανόνα που εφαρμόστηκε). Στον Πίνακα 9 παρουσιάζονται αναλυτικά οι υπολογιστικοί πόροι που χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση κάθε περίπτωσης δεδομένων εισόδου του προβλήματος από την υλοποίηση με τις προκαθορισμένες εικονικές μηχανές και από την εφαρμογή IRaaS και για τις δυο μεθόδους (GEO και ROB).

Παρατηρείται ότι με βάση τον κανόνα αυτόματης ανάθεσης πόρων, για την περίπτωση C7 η εικονική μηχανή 1 χρειάζεται 4 GB RAM και η εικονική μηχανή 3 χρειάζεται 2 GB RAM. Αυτό συμβαίνει διότι στη C7 μεγαλώνει σημαντικά το μέγεθος του προβλήματος. Οι προκαθορισμένες εικονικές μηχανές, ανεξάρτητα από το μέγεθος του προβλήματος, χρειάζονται για όλες τις περιπτώσεις τον ίδιο αριθμό υπολογιστικών πόρων για κάθε εικονική μηχανή. Η βελτίωση και ουσιαστικά η μείωση της χρήσης υπολογιστικών πόρων (ανάλογα με το μέγεθος του προβλήματος) από την εφαρμογή IRaaS έχεις ως αποτέλεσμα και την μείωση

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας 9: Σύγκριση υπολογιστικών πόρων για GEO / ROB

ΠΕΡΙΠΤΩΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ	ΠΡΟΚΑΘΟΡΙΣΜΕΝΕΣ ΕΙΚΟΝΙΚΕΣ ΜΗΧΑΝΕΣ (και για τις τρεις)	ΕΙΚΟΝΙΚΕΣ ΜΗΧΑΝΕΣ IRaaS		
		ΕΙΚΟΝΙΚΗ ΜΗΧΑΝΗ 1	ΕΙΚΟΝΙΚΗ ΜΗΧΑΝΗ 2	ΕΙΚΟΝΙΚΗ ΜΗΧΑΝΗ 3
C1	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM
C2	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM
C3	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM
C4	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM
C5	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM
C6	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM
C7	4cores-2GHz/ 2 GB RAM	1core-2GHz/ 4 GB RAM	1core-2GHz/ 1 GB RAM	1core-2GHz/ 2 GB RAM

του συνολικού κόστους για την εκτέλεση κάθε είδους προβλήματος. Το κόστος υπολογίζεται συναρτήσει των πόρων που δεσμεύει η κάθε εικονική μηχανή αλλά και του απαιτούμενου χρόνου που δεσμεύεται η εικονική μηχανή και είναι σε λειτουργία (μέχρι να πραγματοποιήσει μια ανάλυση). Οπότε λαμβάνοντας υπόψη το μέγεθος των εικονικών μηχανών που χρειάζονται για κάθε περίπτωση επίλυσης προβλήματος, τόσο για τις προκαθορισμένες εικονικές μηχανές όσο και για τις εικονικές μηχανές της εφαρμογής IRaaS, και του χρόνου που χρειάζεται κάθε ξεχωριστή περίπτωση για να επιλύσει το πρόβλημα, έχουμε και μείωση κόστους με χρήση της εφαρμογής IRaaS.

Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι η εφαρμογή παρέχει καλύτερους χρόνους εκτέλεσης, μικρότερη δέσμευση υπολογιστικών πόρων και κατά συνέπεια μικρότερο κόστος για την επίλυση κάθε περίπτωσης του ίδιου προβλήματος συγκριτικά με παλαιότερη υλοποίησή μας όπου οι εικονικές μηχανές είχαν προκαθορισμένους υπολογιστικούς πόρους και δεν βρίσκονταν εγκατεστημένες σε κάποια cloud υποδομή.

4 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το τεχνικό δελτίο του έργου, είναι τα ακόλουθα:

Τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πρότυπο λογισμικό για Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων το οποίο περιλαμβάνει τα ακόλουθα επιμέρους στοιχεία:

- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη προβλημάτων MDMP (μέθοδοι Schwarz, υβριδική αιτιοκρατική/στοχαστική, GEO, ROB).
- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη εναλλακτικών αρχιτεκτονικών (επέκταση Whale).
- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση cloud με χρήση web services.
- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση προσαρμοσμένων (custom) μηχανισμών cloud.
- Η προσαρμοσμένη (custom) πλατφόρμα cloud IRaaS.

Πλέον των παραδοτέων που προέβλεπε το τεχνικό δελτίο, στα πλαίσια της δράσης παρήχθησαν και οι ακόλουθες δημοσιεύσεις:

- Athanasios Fevgas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, ”Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage”, 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), 02-05 Sep 2014, Chania, Crete, Greece.
- Aigli Korfiati, Niki Sfika, Konstantis Daloukas, Christos Alexakos, Panagiota Tsompanopoulou and Spiros Likothanassis, ”IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs”, 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC’15), part of World Congress on Engineering 2015 (WCE 2015). (Certificate of Merit).
- Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, ”Efficient Solution of Large Sparse Linear Systems in Modern Hardware”, 6th International Conference on Information, Intelligence, Systems and Applications (IISA2015), 06-08 Jul 2015, Corfu, Greece.
- Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas and Panagiota Tsompanopoulou, ”Dynamic Cloud Resources Allocation on Multidomain/Multiphysics Problems”, The 3rd International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud 2015), 24-26 August 2015, Rome, Italy.
- Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, ”On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems”, Journal of Mathematics and Statistical Science. Accepted 10/2015, in press.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, and Panayiotis Bozanis, ”A Study of Sparse Matrix Methods on New Hardware: Advances and Challenges”, International Journal of Monitoring and Surveillance Technologies Research (IJMSTR) (to appear).

Επίσης, έχει υποβληθεί προς κρίση η ακόλουθη εργασία:

- N. Vilanakis, E. Maroudas, E. Mathioudakis, Ch. Antonopoulos, Y. Saridakis and M. Vavalis, ”Schwarz Splitting for the Steady State Problem of Saltwater Intrusion in Coastal Aquifiers”, 2015 International Conference on Mathematical Methods & Computational Techniques in Science & Engineering (MMCTSE).

Τέλος, είναι υπό συγγραφή 2 επιστημονικά άρθρα για υποβολή σε επιστημονικά περιοδικά. Το πρώτο αφορά την παράλληλη υλοποίηση 2 μεθόδων της Interface Relaxation (GEO, ROB) στην Πλατφόρμα FEniCS σε περιβάλλον Cloud. Το δεύτερο αφορά την παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου ALOPEX στην Πλατφόρμα FEniCS και την εφαρμογή της στο πρόβλημα Περιβαλλοντικής Μηχανικής (πρόβλημα υφαλμύρισης).

5 Συνεργασίες

Όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγική παράγραφο, η Δράση 4.1 είναι κεντρική στο έργο MATENVMED καθώς καλείται να ενοποιήσει και να συγκεράσει τις ερευνητικές προσπάθειες που αναπτύσσονται στις υπόλοιπες δράσεις του έργου. Σε αυτά τα πλαίσια, ενθάρρυνε τη συνεργασία μεταξύ και των 3 ερευνητικών ομάδων. Πιο συγκεκριμένα, στον Πίνακα 10 συνοψίζονται οι βασικές δραστηριότητες που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της δράσης και αναφέρονται οι ομάδες που συμμετείχαν.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Στα πλαίσια της παρούσας δράσης επελέχθη καταρχήν το FEniCS ως κατάλληλο περιβάλλον επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Ακολούθως επεκτάθηκε με μέθοδοι απαραίτητες για την υποστήριξη των εφαρμογών στις οποίες στοχεύει το έργο MATENVMED. Επίσης, αναπτύχθηκε υποδομή ώστε να είναι δυνατή η αξιοποίηση από το FEniCS μοντέρνων αρχιτεκτονικών (GPUs, FPGAs, γρήγορες συσκευές αποθήκευσης και υποδομές cloud). Ειδικά για την περίπτωση της αξιοποίησης υποδομών cloud εξετάστηκαν δύο διαφορετικές προσεγγίσεις: η παροχή τους με τη μορφή προτυποποιημένων web services, και η προσέγγιση προσαρμοσμένης υλοποίησης περιβάλλοντος cloud (IRaaS).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Προδιαγραφές ΠΕΠ	x	x	x
Απαιτήσεις για υποστήριξη προβλημάτων MDMP	x	x	x
Υλοποίηση Μεθόδου GEO		x	x
Υλοποίηση Μεθόδου ROB		x	x
Υλοποίηση Μεθόδου Schwarz	x	x	
Υλοποίηση Μεθόδου Hybrid		x	x
Υποδομή Υποστήριξης GPUs/FPGAs/Flash Storage		x	
Υποδομή Υποστήριξης Cloud (Web Services)		x	
Υποδομή Υποστήριξης Cloud (IRaaS)			x
Εφαρμογή σε Προβλήματα Υφαλμύρισης	x	x	x

Πίνακας 10: Συνεργασίες στα πλαίσια της Δράσης 4.1.

Βασική επιδίωξη στο άμεσο μέλλον είναι η προτυποποίηση της υποδομής που αναπτύχθηκε και η προσφορά της στην κοινότητα του FEniCS ώστε να είναι ευρέως διαθέσιμη και να αυξηθεί η βάση χρηστών της. Επιπλέον, ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχει η υλοποίηση επιπλέον υπηρεσιών για την υποστήριξη εφαρμογών MDMP και η βελτιστοποίηση επίδοσης. Τέλος, στόχος είναι η αξιοποίηση της πλατφόρμας που αναπτύχθηκε και για άλλες πραγματικές, κρίσιμες εφαρμογές παρόμοιες με αυτές που αποτέλεσαν αντικείμενο του έργου.

Αναφορές

[1] Boost basic linear algebra library, 2014.

[2] Overview of mtl4, 2014.

[3] Martin S. Alnæs. *UFL: a Finite Element Form Language*, chapter 17. Springer, 2012.

[4] Patrick R Amestoy, Iain S Duff, Jean-Yves L'Excellent, and Jacko Koster. A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(1):15–41, 2001.

[5] Patrick R Amestoy, Abdou Guermouche, Jean-Yves L'Excellent, and Stephane Pralet. Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems. *Parallel computing*, 32(2):136–156, 2006.

[6] John E Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou, and YG Saridakis. Discontinuous hermite collocation and diagonally implicit rk3 for a brain tumour invasion model. In *Proceedings of the World Congress on Engineering*, volume 1, 2013.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[7] John E Athanasakis, EP Papadopoulou, and YG Saridakis. Tensor product discontinuous hermite collocation for linear & nonlinear parabolic multidomain problems in 2+1 dimensions. In *Work in progress, personal communication*, 2015.

[8] Haim Avron and Arpan Gupta. Managing data-movement for effective shared-memory parallelization of out-of-core sparse solvers. In *High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC), 2012 International Conference for*, pages 1–11. IEEE, 2012.

[9] Satish Balay, William D. Gropp, Lois Curfman McInnes, and Barry F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In E. Arge, A. M. Bruaset, and H. P. Langtangen, editors, *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.

[10] David M. Beazley. Swig: An easy to use tool for integrating scripting languages with c and c++. In *Proceedings of the 4th Conference on USENIX Tcl/Tk Workshop, 1996 - Volume 4*, TCLTK'96, pages 15–15, Berkeley, CA, USA, 1996. USENIX Association.

[11] X. Cai. Overlapping domain decomposition methods. In HansPetter Langtangen and Aslak Tveito, editors, *Advanced Topics in Computational Partial Differential Equations*, volume 33 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 57–95. Springer Berlin Heidelberg, 2003.

[12] Fedorahosted.org. Suds is a lightweight soap python client for consuming web services., 2014. [Online; accessed 23-October-2014].

[13] N Goedel, T Warburton, and M Clemens. Gpu accelerated discontinuous galerkin fem for electromagnetic radio frequency problems. In *2009 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium*, 2009.

[14] Michael A. Heroux, Roscoe A. Bartlett, Vicki E. Howle, Robert J. Hoekstra, Jonathan J. Hu, Tamara G. Kolda, Richard B. Lehoucq, Kevin R. Long, Roger P. Pawlowski, Eric T. Phipps, Andrew G. Salinger, Heidi K. Thornquist, Ray S. Tuminaro, James M. Willenbring, Alan Williams, and Kendall S. Stanley. An overview of the trilinos project. *ACM Trans. Math. Softw.*, 31(3):397–423, 2005.

[15] Xin-Ming Huang and Jing Ma. An fpga-based accelerator for multiphysics modeling. In *Proceedings of the International Conference on Engineering of Reconfigurable Systems and Algorithms, ERSA'04, June 21-24, 2004, Las Vegas, Nevada, USA*, pages 209–212, 2004.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[16] INRIA. Pastix, 2015. http://pastix.gforge.inria.fr/.

[17] Volodymyr V Kindratenko, Jeremy J Enos, Guochun Shi, Michael T Showerman, Galen W Arnold, John E Stone, James C Phillips, and Wen-mei Hwu. Gpu clusters for high-performance computing. In *Cluster Computing and Workshops, 2009. CLUSTER'09. IEEE International Conference on*, pages 1–8. IEEE, 2009.

[18] Sándor Kocsárdi, Zoltán Nagy, Árpád Csík, and Péter Szolgay. Simulation of 2d inviscid, adiabatic, compressible flows on emulated digital cnn-um. *Int. J. Circuit Theory Appl.*, 37(4):569–585, May 2009.

[19] Aigli Korfiati, Niki Sfika, Konstantis Daloukas, Christos Alexakos, Panagiota Tsompanopoulou, and Spiros Likothanassis. "iraas: A cloud implementation of an interface relaxation method for the solution of pdes". In *Proceedings of 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC'15), part of World Congress on Engineering 2015 (WCE 2015) - Certificate of Merit*, 2015.

[20] PARALUTION Labs. Paralution, 2015. http://www.paralution.com/.

[21] Anders Logg, Kent-Andre Mardal, Garth N. Wells, et al. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.

[22] Anders Logg and Garth N. Wells. Dolfin: Automated finite element computing. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 37(2), 2010.

[23] Arskom Ltd. spyne - rpc that doesn't break your back., 2014. [Online; accessed 23-October-2014].

[24] A. Mantoglou, M. Papantoniou, and P. Giannoulopoulos. Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms. *Journal of Hydrology*, 297:209–228, 2004.

[25] R. Nunez, J. Gonzalez, and J. Camberos. Large-scale numerical solution of partial differential equations with reconfigurable computing, 2007 2007.

[26] N. Papazoglou. *Web Services: Principles and Technology*. Pearson Prentice Hall, 2008.

[27] Hongchan Roh, Sungho Kim, Daewook Lee, and Sanghyun Park. As b-tree: A study of an efficient b+-tree for ssds. *Journal of Information Science and Engineering*, 30(1):85–106, 2014.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[28] Vladimir Rotkin and Sivan Toledo. The design and implementation of a new out-of-core sparse cholesky factorization method. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 30(1):19–46, 2004.

[29] Olaf Schenk. Scalable parallel sparse lu factorization methods on shared memory multiprocessors. Technical report, ETH. Zurich, 2000.

[30] Olaf Schenk and Klaus Gartner. Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with pardiso. *Future Generation Computer Systems*, 20(3):475–487, 2004.

[31] Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas, and Panagiota Tsompanopoulou. ”dynamic cloud resources allocation on multidomain/multiphysics problems”. In *Proceedings of the 3rd International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud 2015)*, Rome, Italy, Aug 2015.

[32] Richard A Shapiro. *Adaptive finite element solution algorithm for the Euler equations*, volume 32. Vieweg+ Teubner Verlag, 2013.

[33] John E. Stone, David Gohara, and Guochun Shi. Opencl: A parallel programming standard for heterogeneous computing systems. *IEEE Des. Test*, 12(3):66–73, May 2010.

[34] P. Stratis, Z. Dokou, G. Karatzas, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis. Stochastic optimization and numerical simulation for pumping management of the hersonissos freshwater coastal aquifer in crete. In *Procs of 2015 Int. Conf. on Water Resources, Hydraulics and Hydrology, Zakynthos, Greece*, pages 329–334.

[35] P. Stratis, G. Karatzas, E. Papadopoulou, M. Zakynthinaki, and Y. Saridakis. Stochastic optimization for an analytical method of saltwater intrusion on coastal aquifers. submitted to PLOSone, 2015.

[36] P. Stratis, Y. Saridakis, M. Zakynthinaki, and E. Papadopoulou. Alopex stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 490. 2014.

[37] Julien C Thibault. *Implementation of a Cartesian grid incompressible Navier-Stokes solver on multi-GPU desktop platforms using CUDA*. PhD thesis, Boise State University, 2009.

[38] Sivan Toledo, Doron Chen, and Vladimir Rotkin. Taucs: A library of sparse linear solvers. Technical report, School of Computer Science, Tel-Aviv University, 2003.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[39] Panagiota Tsompanopoulou and Emmanouil Vavalis. ”analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations”. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 226(2):370–387, 2009.

[40] Manolis Vavalis. Implementing hybrid PDE solvers, 08 2014.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Η΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 4.2

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **4**
1.1 Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης Runge-Kutta 4
1.2 Μοντέλα Βιολογικής Εισβολής Πληθυσμών και Διάχυσης Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο 5
1.3 Εξέλιξη Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου με χρήση Απεικονίσεων MRI και Πλατφόρμας FeniCS 5

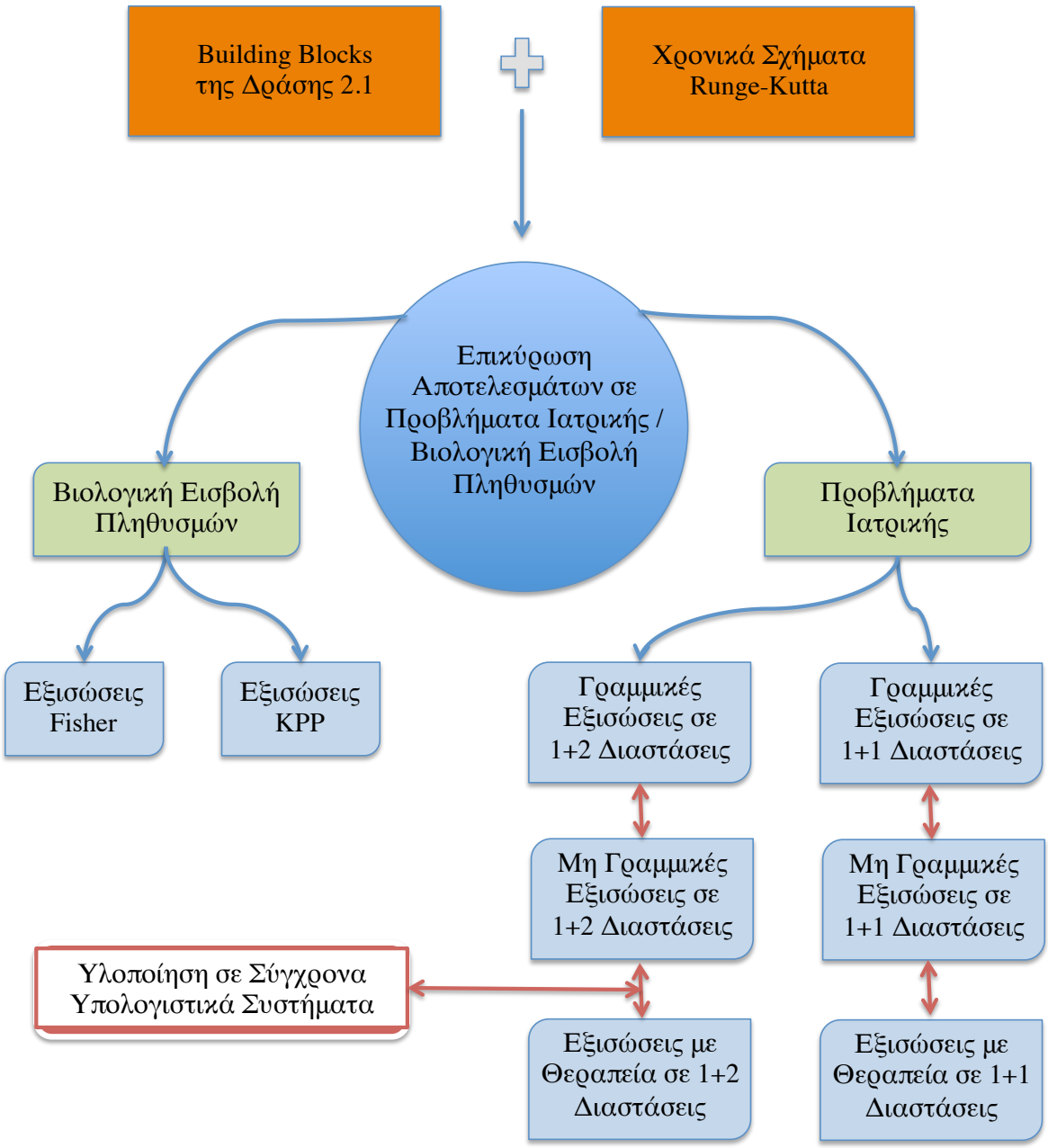
2 Μεθοδολογία **5**
2.1 Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης Runge-Kutta 5
2.2 Μοντέλα Βιολογικής Εισβολής και Διάχυσης Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο 7
2.2.1 Μοντέλα Βιολογικής Εισβολής Πληθυσμών 8
2.2.2 Μοντέλα Διάχυσης Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο . . 8
2.2.3 Αδιάστατη μορφή και τεχνικές επανέναρξης 9
2.2.4 Μη-γραμμικά μοντέλα καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις δύο χωρικές διαστάσεις 13
2.3 Εξέλιξη Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου με χρήση Απεικονίσεων MRI και Πλατφόρμας FeniCS 15

3 Αποτελέσματα **18**
3.1 Επικύρωση της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου 18
3.1.1 Πρόβλημα Εφαρμογής I: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων 18
3.1.2 Πρόβλημα Εφαρμογής II: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις τεσσάρων αρχικών πηγών καρκινικών κυττάρων 21
3.2 Επικύρωση της ασυνεχούς μεθόδου Collocation (dDHC) σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου 24
3.2.1 Πρόβλημα Εφαρμογής I: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων 24
3.2.2 Πρόβλημα Εφαρμογής II: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις τριών αρχικών πηγών καρκινικών κυττάρων . . . 26
3.2.3 Πρόβλημα Εφαρμογής III: Μη-Γραμμικό μοντέλο στις 1+2 διαστάσεις μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων . . . 27
3.3 Επικύρωση Εξέλιξης Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου με χρήση Απεικονίσεων MRI και Πλατφόρμας FeniCS 31

4 Παραδοτέα **33**

5 Συνεργασίες **33**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Σκοπό της παρούσας δράσης αποτελεί η επικύρωση των μαθηματικών μεθόδων και του λογισμικού που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια των δράσεων του έργου σε προβλήματα Ιατρικής με ιδιαίτερη έμφαση στο πρόβλημα της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου και, γενικότερα, της βιολογικής εισβολής πληθυσμών.

Στα πλαίσια αυτά, κατά τη διάρκεια του έργου, τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα της δράσης αναφέρονται:

- Στον συνδυασμό αριθμητικών σχημάτων χρονικής διακριτοποίησης Runge-Kutta και της ασυνεχούς μεθόδου dDHC (βλ. Τελική Τεχνική Έκθεση 2015 Δράσης 2.1) για την επίλυση σε σειριακά και ετερογενή (CPU/GPU) παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα:
  - Γραμμικών και μη-γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+1 και 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes) τα οποία δύνανται να ενσωματώνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας.
  - Μη-γραμμικών μοντέλων βιολογικής εισβολής πληθυσμών που περιγράφονται από τις γενικευμένες ΜΔΕ του Fisher και των Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov.
- Στην επικύρωση της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά (βλ. Τελική Τεχνική Έκθεση 2015 Δράσης 2.4) μέσω της μελέτης γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+1 διαστάσεις τα οποία δύνανται να ενσωματώνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας.
- Στην μελέτη γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε πραγματικά εγκεφαλικά πεδία που περιγράφονται από MRI εγκεφάλου μέσω της πλατφόρμας λογισμικού FEniCS (βλ. Τελική Τεχνική Έκθεση 2015 Δράσης 4.1).

1.1 Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης Runge-Kutta

Για την ευσταθή και υψηλής ακρίβειας επίλυση των συστημάτων Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ), τα οποία προέρχονται από την εφαρμογή της ασυνεχούς dDHC μεθόδου σε γενικά γραμμικά και μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή των ιατρικών εφαρμογών ενδιαφέροντος, θεωρήσαμε σχήματα χρονικής διακριτοποίησης Runge-Kutta τύπου DIRK, SSP και IMEX με σκοπό την μελέτη της συμπεριφοράς τους και της υπολογιστικής αποτελεσματικότητας τους όσον αφορά την παρουσία ή μη μη-γραμμικών όρων και ασυνεχών συντελεστών.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1.2 Μοντέλα Βιολογικής Εισβολής Πληθυσμών και Διάχυσης Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο

Με σκοπό τη μελέτη συμπεριφοράς των μαθηματικών μεθόδων όσο αφορά την παρουσία μη-γραμμικών όρων καθώς και χωρικών ή/και χρονικών ασυνεχειών θεωρήσαμε και περιγράφουμε γραμμικά και μη γραμμικά μοντέλα ΜΔΕ τα οποία προσομοιώνουν την μετακίνηση/εισβολή πληθυσμών σε ομοιογενή και ανομοιογενή περιβάλλοντα, καθώς και μοντέλα διάχυσης καρκινικού όγκου σε αναμοιογενή εγκεφαλικό ιστό τα οποία προσομοιώνουν κατάλληλα πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας που μπορεί να δεχτεί ένας ασθενής.

1.3 Εξέλιξη Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου με χρήση Απεικονίσεων MRI και Πλατφόρμας FeniCS

Αντικείμενο της ερευνητικής αυτής δραστηριότητας είναι η χρήση της πλατφόρμας FeniCS, η οποία επελέγη στην Δράση 4.1 ως το Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ) του έργου, για την μελέτη μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε ανομοιογενή εγκεφαλικό ιστό, ο οποίος περιγράφεται από απεικονίσεις MRI του εγκεφάλου. Στο πλαίσιο αυτό αναπτύξαμε αρχικά (βλ. Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2014) τεχνικές αναγνώρισης, ψηφιοποίησης και διακριτοποίησης περιοχών εγκεφαλικού ιστού με διαφορετικό συντελεστή διάχυσης, οι οποίες στη συνέχεια εισήχθησαν στην πλατφόρμα FeniCS και μέσω της οποίας παρήχθησαν τα πρώτα αποτελέσματα αναφορικά με γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων. Στους μελλοντικούς μας στόχους εντάσσεται η μελέτη μη-γραμμικών εξελικτικών μοντέλων που ενσωματώνουν και πρωτόκολλα θεραπείας.

2 Μεθοδολογία

2.1 Σχήματα Χρονικής Διακριτοποίησης Runge-Kutta

Για να περιγράψουμε συστήματα ΣΔΕ τα οποία προκύπτουν από τη χωρική διακριτοποίηση εξελικτικών προβλημάτων ΠΑΣΣ-ΠΠ με την ασυνεχή μέθοδο dDHC (βλ. Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1), θεωρούμε ένα γενικευμένο σύστημα ΣΔΕ στην μορφή:

$$\dot{\boldsymbol{a}} = \tilde{L}(\boldsymbol{a}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}) \tag{1}$$

όπου $\tilde{L}(\cdot)$ και $\tilde{G}(\cdot)$ είναι διανυσματικοί τελεστές οι οποίοι περιγράφουν αντίστοιχα τους γραμμικούς και τους μη γραμμικούς όρους του συστήματος. Τα χρονικά σχήματα που μελετήσαμε ανήκουν στις γνωστές κατηγορίες μεθόδων Runge-Kutta (RK) (βλ. για παράδειγμα [2, 3, 8, 16, 17, 19, 25, 26, 27, 28]):

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Diagonally Implicit RK (DIRK) τρίτης τάξεως ($\lambda = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{2}$)
- Strong Stability Preserving RK (SSPRK) τρίτης τάξεως, τριών και τεσσάρων βημάτων,
- Implicit Explicit RK (IMEX RK) δευτέρας τάξεως ($\lambda = 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}$)

οι οποίες περιγράφονται ως εξής:

DIRK(2,3)

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}^{(1)} = \boldsymbol{a}^n &+ \lambda\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)})\right) \\
\boldsymbol{a}^{(2)} = \boldsymbol{a}^n &+ \Delta t \left[(1-2\lambda)\left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)})\right) + \lambda\left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(2)})\right)\right] \\
\boldsymbol{a}^{n+1} = \boldsymbol{a}^n &+ \frac{\Delta t}{2}\left[\left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)})\right) + \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(2)})\right)\right]
\end{aligned}
$$

SSP(3,3)

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}^{(1)} &= \boldsymbol{a}^n + \Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^n) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^n)\right) \\
\boldsymbol{a}^{(2)} &= \frac{3}{4}\boldsymbol{a}^n + \frac{1}{4}\boldsymbol{a}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)})\right) \\
\boldsymbol{a}^{n+1} &= \frac{1}{3}\boldsymbol{a}^n + \frac{2}{3}\boldsymbol{a}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(2)})\right)
\end{aligned}
$$

SSP(4,3)

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}^{(1)} &= \boldsymbol{a}^n + \frac{1}{2}\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^n) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^n)\right) \\
\boldsymbol{a}^{(2)} &= \boldsymbol{a}^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)})\right) \\
\boldsymbol{a}^{(3)} &= \frac{2}{3}\boldsymbol{a}^n + \frac{1}{3}\boldsymbol{a}^{(2)} + \frac{1}{6}\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(2)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(2)})\right) \\
\boldsymbol{a}^{n+1} &= \boldsymbol{a}^{(3)} + \frac{1}{2}\Delta t \left(\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(3)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(3)})\right)
\end{aligned}
$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

IMEX RK(3,3,2)

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{a}^{(1)} &= \boldsymbol{a}^n + \lambda\Delta t\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) \\
\boldsymbol{a}^{(2)} &= \boldsymbol{a}^n + \Delta t\tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \Delta t(1-2\lambda)\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \lambda\Delta t\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(2)}) \\
\boldsymbol{a}^{(3)} &= \boldsymbol{a}^n + \frac{\Delta t}{4}\left[\tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(2)}\right] + \Delta t(\frac{1}{2}-\lambda)\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \lambda\Delta t\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(3)}) \\
\boldsymbol{a}^{n+1} &= \boldsymbol{a}^n + \frac{\Delta t}{6}\left[\tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(2)}) + 4\tilde{G}(\boldsymbol{a}^{(3)})\right] \\
&+ \frac{\Delta t}{6}\left[\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(1)}) + \tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(2)}) + 4\tilde{L}(\boldsymbol{a}^{(3)})\right]
\end{aligned}
$$

Σε σχέση με την απόδοση (υπολογιστική, ευστάθειας) των ανωτέρω σχημάτων, όταν συνδυάζονται με την ασυνεχή dDHCE μέθοδο, πειραματική παρατήρηση μας οδήγησε στα εξής συμπεράσματα:

- σχήματα DIRK είναι αποδοτικά για γραμμικά προβλήματα σε ομοιογενή (συνεχείς συντελεστές) και ανομοιογενή (ασυνεχείς συντελεστές) πεδία
- σχήματα SSPRK είναι αποδοτικά για μη-γραμμικά προβλήματα σε ομοιογενή (συνεχείς συντελεστές) πεδία
- σχήματα IMEX RK είναι αποδοτικά για μη-γραμμικά προβλήματα ανομοιογενή (ασυνεχείς συντελεστές) πεδία.

Συνεπώς, σχήματα DIRK και IMEX χρησιμοποιήθηκαν αντίστοιχα σε γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών κυττάρων σε ανομοιογενή εγκεφαλικό ιστό, ενώ σχήματα SSPRK χρησιμοποιήθηκαν σε γενικευμένα Fisher και KPP μη-γραμμικά προβλήματα βιολογικής εισβολής/μετακίνησης πληθυσμών σε ομοιογενή περιβάλλοντα.

2.2 Μοντέλα Βιολογικής Εισβολής και Διάχυσης Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο

Οι γενικές και γραμμικές και μη-γραμμικές παραβολικές εξισώσεις πολλαπλών πεδίων, των οποίων την λύση μελετήσαμε στη Δράση 2, βρίσκουν εφαρμογές σε πολλά και σημαντικά σύγχρονα προβλήματα όπως για παράδειγμα η περιβαλλοντική μόλυνση, η ροή ρευστών και καυσαερίων κ.α. Εμείς για τις ανάγκες του έργου στο πλαίσιο της παρούσας δράσης μελετήσαμε μοντέλα προβλημάτων τα οποία αναφέρονται στη Βιολογική Εισβολή Πληθυσμών (βλ. για παράδειγμα [4, 5, 10, 14, 15, 18, 20, 22]) και στη Διάχυση Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο (βλ. για παράδειγμα [1, 6, 7, 11, 13, 23, 24, 29, 30, 31, 32, 33, 34]).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η μαθηματική περιγραφή των προβλημάτων αυτών περιγράφεται εν συντομία στις επόμενες παραγράφους.

2.2.1 Μοντέλα Βιολογικής Εισβολής Πληθυσμών

Τα κύρια μοντέλα βιολογικής εισβολής πληθυσμών σε ομοιογενές, κυρίως, περιβάλλον που μελετήσαμε είναι οι γενικευμένες εξισώσεις Fisher (βλ. [15, 10]) και Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov (βλ. [18]) οι οποίες περιγράφονται ως εξής:

- Γενικευμένη Εξίσωση Fisher

$$u_t = [(\lambda_0 u + \lambda_1)u_x]_x + \lambda_2 u - \lambda_3 u^2 \tag{2}$$

- Γενικευμένη Εξίσωση KPP

$$u_t = [(\lambda_0 u + \lambda_1)u_x]_x + \sum_{k=1}^{M} \lambda_{k+1} u^k \tag{3}$$

Επισημαίνουμε ότι και οι δύο εξισώσεις περιγράφουν μοντέλα σε ομοιογενές περιβάλλον με πυκνοεξαρτώμενο συντελεστή διάχυσης.

2.2.2 Μοντέλα Διάχυσης Καρκινικών Όγκων στον Εγκέφαλο

Το πρόβλημα διάχυσης επιθετικών καρκινικών όγκων (γλοιώματα) στον εγκέφαλο αποτελεί το κυρίαρχο πρόβλημα επικύρωσης μεθόδων. Στην κατεύθυνση αυτή χρησιμοποιήσαμε τα γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα της Swanson [30, 31, 32] εφοδιασμένα με πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας [23, 24] τα οποία, σε συνδυασμό με χειρουργική επέμβαση, θεωρούνται αναγκαία για την αντιμετώπιση της νόσου. Οι βασικές εξισώσεις που περιγράφουν τα ανωτέρω μοντέλα έχουν την μορφή:

- Γραμμική Εξίσωση Όγκου χωρίς θεραπεία

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{\boldsymbol{x}})\nabla \bar{c}\right) + \rho \bar{c} \tag{4}$$

- Μη Γραμμική Εξίσωση Όγκου χωρίς θεραπεία

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{\boldsymbol{x}})\nabla \bar{c}\right) + \rho \bar{c}\left(1 - \frac{\bar{c}}{\bar{c}_{lim}}\right) \tag{5}$$

- Γραμμική Εξίσωση Όγκου με θεραπεία

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{\boldsymbol{x}})\nabla \bar{c}\right) + \rho \bar{c} - \bar{R}(\bar{c}, \bar{t}) - \bar{G}(\bar{c}, \bar{t}) \tag{6}$$

- Μη Γραμμική Εξίσωση Όγκου με θεραπεία

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{\boldsymbol{x}})\nabla \bar{c}\right) + \rho \bar{c}\left(1 - \frac{\bar{c}}{\bar{c}_{lim}}\right) - \bar{R}(\bar{c},\bar{t}) - \bar{G}(\bar{c},\bar{t}) \tag{7}$$

Στις επόμενες δύο παραγράφους παρουσιάζουμε τα φυσικά μεγέθη που χαρακτηρίζουν τις ανωτέρω ΜΔΕ, την αδιάστατη μορφή τους καθώς και τεχνικές επανέναρξης που χρησιμοποιήσαμε για την αντιμετώπιση των χρονικών ασυνεχειών που συνοδεύουν τα πρωτόκολλα θεραπείας.

2.2.3 Αδιάστατη μορφή και τεχνικές επανέναρξης

Για λόγους απλούστερης περιγραφής, ας θεωρήσουμε το γραμμικό πρόβλημα στις 1+1 διαστάσεις που περιγράφεται από την ΜΔΕ (βλ. [31], [23],[24]):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}}\left(\bar{D}\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{x}}\right) + \bar{\rho}\,\bar{c} - \bar{R}(\bar{c},\bar{t}) - \bar{G}(\bar{c},\bar{t})\ , \tag{8}$$

όπου $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ συμβολίζει την συγκέντρωση/αριθμό των καρκινικών κυττάρων στη θέση $\bar{x} \in \mathbb{R}$ την χρονική στιγμή $\bar{t}$, $\bar{\rho}$ συμβολίζει τον ρυθμό αναπαραγωγής (proliferation rate) των κυττάρων (βλ. [11]), $\bar{D}$ συμβολίζει το ρυθμό διάχυσης των καρκινικών κυττάρων στον ιστό του εγκεφάλου, ενώ οι όροι $\bar{R}(\bar{c},\bar{t})$ και $\bar{G}(\bar{c},\bar{t})$ περιγράφουν αντίστοιχα την επίδραση της ραδιοθεραπείας και της χημειοθεραπείας. Τα μεγέθη αυτά συνδέονται με τις εξής φυσικές μονάδες:

$$\begin{cases} [\bar{x}] = cm, \quad [\bar{t}] = day, \quad [\bar{c}] = cells \cdot day^{-1} \\ [\bar{D}] = cm^2 \cdot day^{-1}, \quad [\bar{\rho}] = day^{-1}, \\ [\bar{R}] = day^{-1}, \quad [\bar{G}] = day^{-1} \end{cases} \tag{9}$$

Η παραπάνω ΜΔΕ συνοδεύεται από μηδενικές συνοριακές συνθήκες τύπου Neumann καθώς και από μία αρχική συνθήκη της μορφής $\bar{c}(\bar{x},0) = \bar{f}(\bar{x})$, όπου $\bar{f}(\bar{x})$ συμβολίζει την αρχική χωρική κατανομή των καρκινικών κυττάρων.

Ο χαρακτηρισμός της ετερογένειας του εγκεφαλικού ιστού (φαιά και λευκή ουσία) επιτυγχάνεται με τον ασυνεχή συντελεστή διάχυσης $\bar{D}$ ο οποίος ορίζεται [30, 31] ως:

$$\bar{D} \equiv \bar{D}(\bar{x}) = \begin{cases} D_w, & \bar{x} \text{ ανήκει στην λευκή ουσία } (\bar{x} \in \bar{\Omega}_w) \\ D_g, & \bar{x} \text{ ανήκει στην φαιά ουσία } (\bar{x} \in \bar{\Omega}_g) \end{cases}, \tag{10}$$

όπου D_w και D_g είναι βαθμωτές ποσότητες με $D_w > D_g$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Θεωρώντας μια χαμηλής δόσης τμηματική ακτινοθεραπεία, στο χρονικό διάστημα $(\bar{T}_G, \bar{T}_M]$, η επίδραση της ραδιοθεραπείας περιγράφεται (βλ. [23]):

$$\bar{R}(\bar{c}, \bar{t}) = \bar{R}(\bar{t})\bar{c} \text{ με } \bar{R} \equiv \bar{R}(\bar{t}) := R_{\text{eff}} k_R \,, \tag{11}$$

όπου $k_R(\bar{t})$ δηλώνει το προφίλ του χρονοδιαγράμματος της ακτινοθεραπείας χρησιμοποιώντας ως χρονικό βήμα μιας ημέρας και παίρνει την τιμή 1 κατά την διάρκεια της θεραπείας ενώ για τις υπόλοιπες ημέρες 0 :

$$k_R(\bar{t}) = \begin{cases} 1, & \bar{t} \in (\bar{T}_G, \bar{T}_M] \\ 0, & \bar{t} \notin (\bar{T}_G, \bar{T}_M] \end{cases} . \tag{12}$$

R_{eff} δηλώνει την επίδραση των n τμηματικών δόσεων της θεραπείας ανά ημέρα και περιγράφεται από (βλ. [23])

$$R_{\text{eff}} = \alpha(nd) + 2\beta n d^2 \left[g(\mu\tau) + 2\frac{\cosh(\mu\tau) - 1}{(\mu\tau)^2} h_n(\phi) \right],$$

με

$$g(\mu\tau) = \frac{\mu\tau - 1 + e^{-\mu\tau}}{(\mu\tau)^2} \text{ και}$$
$$h_n(\phi) = \frac{(n - 1 - n\phi + \phi^n)\phi}{n(1-\phi)^2}$$

όπου α, β είναι παράμετροι που εξαρτώνται απο τον ασθενή, d ο ρυθμός της δόσης το χρόνο $\bar{t}$, μ είναι ο χρόνος αναγέννησης των κατεστραμμένων ιστών, τ είναι η διάρκεια της ακτινοθεραπείας και το $\phi = e^{-\mu(\tau + \Delta\tau)}$ με $\Delta\tau$ δηλώνει το χρόνο ανάμεσα σε δύο τμηματικές δόσεις. Σημειώνουμε ότι οι τιμές των παραπάνω παραμέτρων παρατίθενται στον πίνακα 1 του [23].

Αντίστοιχα θεωρώντας ένα λογαριθμικό μοντέλο χημειοθεραπείας, ο όρος της χημειοθεραπείας $\bar{G}(\bar{c}, \bar{t})$ δίνεται (βλ. [23]) στη μορφή:

$$\bar{G}(\bar{c}, \bar{t}) = \bar{G}(\bar{t})\bar{c} \tag{13}$$

με

$$\bar{G} \equiv \bar{G}(\bar{t}) := \begin{cases} k_G, & \bar{t} \in (\bar{T}_R, \bar{T}_N] \\ 0, & \bar{t} \notin (\bar{T}_R, \bar{T}_N] \end{cases}$$

όπου k_G δηλώνει το ρυθμό θανάτου των κυττάρων ο οποίος είναι ανάλογος της συγκέντρωσης του φαρμάκου.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε ένα συγκεκριμένο πρωτόκολλο θεραπείας το οποίο χαρακτηρίζεται από τα ακόλουθα χρονικά διαστήματα:

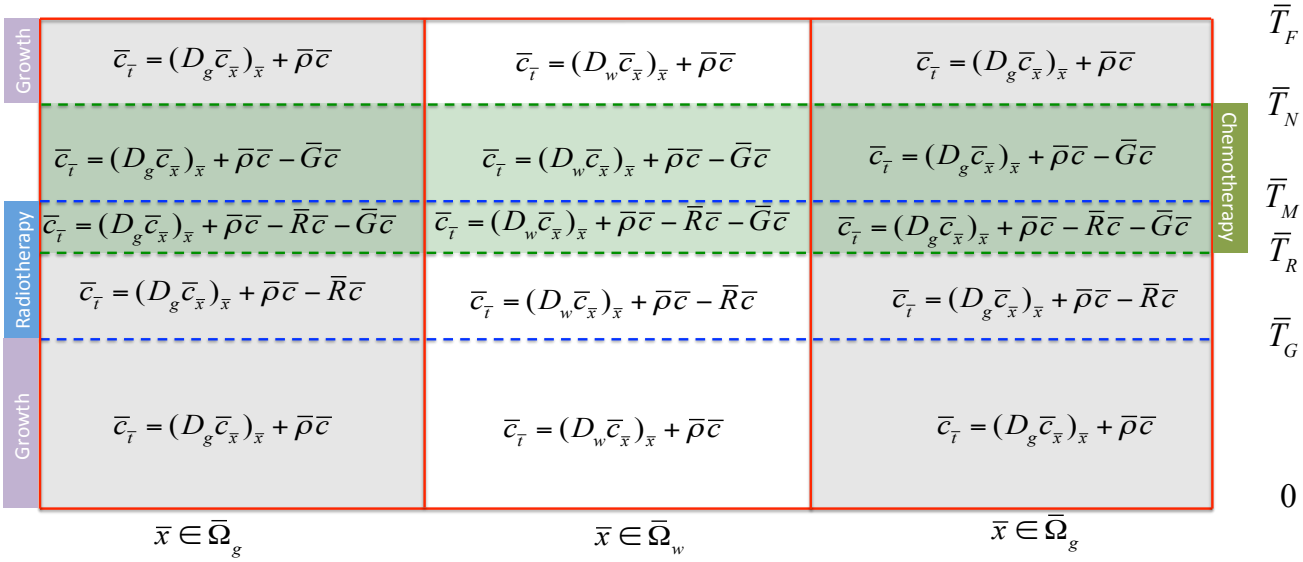
$$0 < \bar{T}_G < \bar{T}_R < \bar{T}_M < \bar{T}_N < \bar{T}_F \,, \tag{14}$$

κατά τα οποία η εξέλιξη της συγκέντρωσης/διάχυσης των καρκινικών κυττάρων ακολουθεί το παρακάτω πρωτόκολλο:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- μια περίοδο χωρίς θεραπεία $\bar{t} \in (0, \bar{T}_G]$,
- μια περίοδο με ραδιοθεραπεία $\bar{t} \in (\bar{T}_G, \bar{T}_R]$,
- μια περίοδο με ραδιο-χημειοθεραπεία $\bar{t} \in (\bar{T}_R, \bar{T}_M]$,
- μια περίοδο με χημειοθεραπεία $\bar{t} \in (\bar{T}_M, \bar{T}_N]$ και
- μια περίοδο χωρίς θεραπεία $\bar{t} \in (\bar{T}_N, \bar{T}_F]$.

που περιγράφεται σχηματικά στο Σχήμα 1.



Σχήμα 1: Το πρωτόκολλο θεραπείας και η αντίστοιχη διαφορική εξίσωση σε κάθε χωρο-χρονικό διάστημα.

Εάν τώρα ορίσουμε

$$\begin{cases} \bar{c}(\bar{x}, \bar{t}_1) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{t}) & , \ \bar{t} \in (0, \bar{T}_G] \\ \bar{c}(\bar{x}, \bar{t}_2) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{t} - \bar{T}_G) & , \ \bar{t} \in (\bar{T}_G, \bar{T}_R] \\ \bar{c}(\bar{x}, \bar{t}_3) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{t} - \bar{T}_R) & , \ \bar{t} \in (\bar{T}_R, \bar{T}_M] \\ \bar{c}(\bar{x}, \bar{t}_4) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{t} - \bar{T}_M) & , \ \bar{t} \in (\bar{T}_M, \bar{T}_N] \\ \bar{c}(\bar{x}, \bar{t}_5) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{t} - \bar{T}_N) & , \ \bar{t} \in (\bar{T}_N, \bar{T}_F] \end{cases} \quad (15)$$

το μαθηματικό μοντέλο μπορεί να γραφεί στην μορφή:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}_\ell} = \dfrac{\partial}{\partial \bar{x}}\left(\bar{D}\dfrac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{x}}\right) + \bar{\rho}_\ell\, \bar{c}\ ,\ \bar{x} \in [\bar{a}, \bar{b}]\ ,\ 0 < \bar{t}_\ell \leq \bar{T}_\ell \\ \bar{c}\,(\bar{x}, 0) = \bar{c}_\ell(\bar{x}) \\ \bar{c}_{\bar{x}}\,(\bar{a}, \bar{t}_\ell) = \bar{c}_{\bar{x}}\left(\bar{b}, \bar{t}_\ell\right) = 0 \end{cases} \tag{16}$$

όπου

$$\begin{cases} \bar{\rho}_1 = \bar{\rho}, & \bar{T}_1 = \bar{T}_G \\ \bar{\rho}_2 = \bar{\rho} - R_{\text{eff}}, & \bar{T}_2 = \bar{T}_R - \bar{T}_G \\ \bar{\rho}_3 = \bar{\rho} - R_{\text{eff}} - k_G, & \bar{T}_3 = \bar{T}_M - \bar{T}_R \\ \bar{\rho}_4 = \bar{\rho} - k_G, & \bar{T}_4 = \bar{T}_N - \bar{T}_M \\ \bar{\rho}_5 = \bar{\rho}, & \bar{T}_5 = \bar{T}_F - \bar{T}_N \end{cases} \tag{17}$$

και

$$\begin{cases} \bar{c}_1(\bar{x}) = \bar{f}(\bar{x}) \\ \bar{c}_2(\bar{x}) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{T}_1) \\ \bar{c}_3(\bar{x}) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{T}_2) \\ \bar{c}_4(\bar{x}) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{T}_3) \\ \bar{c}_5(\bar{x}) = \bar{c}(\bar{x}, \bar{T}_4) \end{cases} \tag{18}$$

Χρησιμοποιώντας, στη συνέχεια, τις αδιάστατες μεταβλητές (βλ. [30], [1])

$$\begin{cases} x = \chi\bar{x},\ \ a = \chi\bar{a},\ \ b = \chi\bar{b},\ \ t_\ell = \bar{\rho}\bar{t}_\ell, \\ c\,(x, t_\ell) = \dfrac{1}{\chi N_0}\,\bar{c}\,(\chi\bar{x}, \bar{\rho}\bar{t}_\ell) \\ c_\ell\,(x) = \dfrac{1}{\chi N_0}\bar{c}_\ell\,(\chi\bar{x}) \\ D = \dfrac{\bar{D}}{D_w}\ ,\ \rho_\ell = \dfrac{\bar{\rho}_\ell}{\bar{\rho}} \end{cases} \tag{19}$$

όπου

$$\chi = \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{D_w}}\ \ ,\ \ N_0 = \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} \bar{f}\,(\bar{x})\,d\bar{x} \ \text{ και } \ T_j = \bar{\rho}\bar{T}_j\ , \tag{20}$$

με N_0 να δηλώνει τον αρχικό αριθμό των καρκινικών κυττάρων στο $[\bar{a}, \bar{b}]$, καταλήγουμε στην αδιάστατη μορφή του προβλήματος (16):

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

$$\begin{cases} \dfrac{\partial c}{\partial t_\ell} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D\dfrac{\partial c}{\partial x}\right) + \rho_\ell c \ , \ x \in [a,b] \ , \ 0 < t_\ell \leq T_\ell \\ c\left(x,0\right) = c_\ell\left(x\right) \\ c_x\left(a,t_\ell\right) = c_x\left(b,t_\ell\right) = 0 \end{cases} \tag{21}$$

Τέλος, το λήμμα (βλ. [29]) που ακολουθεί μας οδηγεί στην τελική μορφή του μοντέλου που χρησιμοποιούμε:

Lemma 1. *Εάν η* $c(x,t_\ell),\ \ell = 1,2,3,4,5$ *ικανοποιεί το ΠΑΣΤ στο (21)-(20) και η* $u(x,t_\ell)$ *ορίζεται από την σχέση*

$$u(x,t_\ell) = e^{-\rho_\ell t_\ell} c(x,t_\ell), \tag{22}$$

τότε η $u(x,t_\ell),\ \ell = 1,2,3,4,5$ *ικανοποιεί το ΠΑΣΤ*

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t_\ell} = \dfrac{\partial}{\partial x}\left(D\dfrac{\partial u}{\partial x}\right) \ , \ x \in [a,b] \ , \ 0 < t_\ell \leq T_\ell \\ u\left(x,0\right) = u_\ell\left(x\right) \equiv c_\ell\left(x\right) \\ u_x\left(a,t_\ell\right) = u_x\left(b,t_\ell\right) = 0 \end{cases} . \tag{23}$$

Σημειώνουμε ότι, αν $M_\delta \geq 1$ είναι το πλήθος των αρχικών σημειακών κακοηθών πηγών με κέντρα τα σημεία $x = \xi_r$, $r = 1, \cdots, M_\delta$, τότε θεωρούμε ότι η $u_1(x)$ εκφράζεται ως

$$u_1(x) = \sum_{r=1}^{M_\delta} \zeta_r \delta(x - \xi_r), \quad \xi_r \in (a,b) \ , \ \zeta \in \mathbb{R} \ , \tag{24}$$

όπου $\delta(x)$ δηλώνει την συνάρτηση delta του Dirac.

2.2.4 Μη-γραμμικά μοντέλα καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις δύο χωρικές διαστάσεις

Για την γενίκευση στις δύο χωρικές διαστάσεις θεωρούμε το μη γραμμικό μοντέλο:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \frac{\partial}{\partial \bar{x}}\left(\bar{D}\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{x}}\right) + \frac{\partial}{\partial \bar{y}}\left(\bar{D}\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{y}}\right) + \bar{\rho}\ \bar{c}(1 - \frac{\bar{c}}{\bar{c}_{lim}}) - \bar{R}(\bar{c},\bar{t}) - \bar{G}(\bar{c},\bar{t}) \ , \tag{25}$$

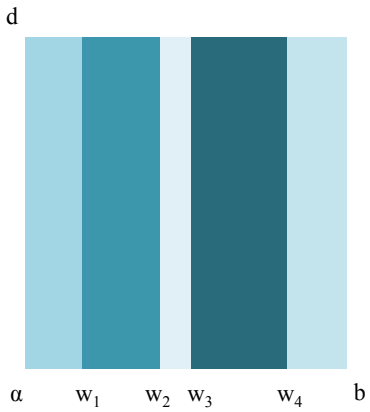
όπου η παράμετρος $\bar{c}_{lim}$ εκφράζει τον μέγιστο αριθμό (φέρουσα ικανότητα - carrying capacity) των καρκινικών κυττάρων που μπορούν να διατηρηθούν στον εγκέφαλο.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Θεωρώντας τα ίδια πρωτόκολλα θεραπείας και ακολουθώντας παρόμοια τεχνική και ανάλυση με το γραμμικό μοντέλο εύκολα κανείς μπορεί να παράξει την αδιάστατη έκδοση του μοντέλου η οποία έχει τη μορφή:

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) - R(c) - G(c) \ , \quad (x,y) \in \Omega \equiv [a,b] \times [a,d] \\ \dfrac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \ , \quad (x,y) \in \partial\Omega \\ c(x,y,0) = f(x,y) \end{cases} \tag{26}$$

Τον συντελεστή διάχυσης $D \equiv D(x,y)$ τον θεωρούμε ασυνεχή, με τέτοιο τρόπο ώστε να χαρακτηρίζει προβλήματα πολλαπλών περιοχών τύπου Stripes.



Σχήμα 2: Αντιπροσωπευτική μορφή συντελεστού διάχυσης για προβλήματα τύπου κατακόρυφων λωρίδων (stripes).

Ειδικότερα, αν θεωρήσουμε το πρόβλημα των κατακόρυφων Stripes (βλ. Σχήμα 2), το οποίο γενικά χαρακτηρίζεται από τις K γραμμές διεπαφής

$$x = w_k \ , \ k = 1, \cdots, K \quad \text{όπου} \quad a = w_0 < w_1 < \cdots < w_k < \cdots < w_K < w_{K+1} = b$$

κάθετες στον άξονα $x'x$, και τα $K+1$ χωρία $\mathcal{W}_k$ τύπου Stripes

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) \times (a,d) \ , \quad k = 1, \ldots, K+1 \ , \tag{27}$$

τότε ο συντελεστής διάχυσης ορίζεται ως

$$D(x,y) = \gamma_k \in \mathbb{R} \ \text{ για } \ (x,y) \in \mathcal{W}_k \ , \quad k = 1, \ldots, K+1 \ . \tag{28}$$

Για την επίλυση της παραπάνω εξίσωσης, χρησιμοποιήσαμε το σχήμα dDHC-IMEXRK που έχουμε ήδη αναπτύξει στη Δράση 2.1 για τη γενική μη γραμμική εξίσωση στις 1+2 διαστάσεις.

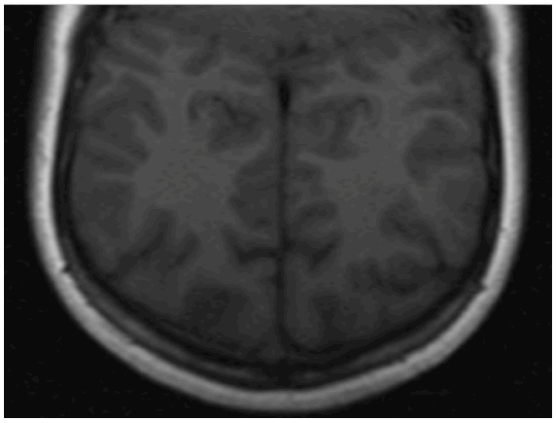
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.3 Εξέλιξη Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου με χρήση Απεικονίσεων MRI και Πλατφόρμας FeniCS

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, αντικείμενο της ερευνητικής αυτής δραστηριότητας είναι:

- η χρήση της πλατφόρμας λογισμικού ανοικτού κώδικα FeniCS [35, 36], η οποία υλοποιεί αριθμητικές μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων και επελέγη στην Δράση 4.1 ως το Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ) του έργου, για την μελέτη μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε ανομοιογενή εγκεφαλικό ιστό,
- η μελέτη μοντέλων ρεαλιστικής γεωμετρίας η οποία περιγράφεται από απεικονίσεις MRI του εγκεφάλου.

Στο πλαίσιο αυτό αναπτύξαμε αρχικά τεχνικές αναγνώρισης, ψηφιοποίησης και διακριτοποίησης περιοχών εγκεφαλικού ιστού με διαφορετικό συντελεστή διάχυσης, οι οποίες στη συνέχεια εισήχθησαν στην πλατφόρμα FeniCS και μέσω της οποίας παρήχθησαν τα πρώτα αποτελέσματα αναφορικά με γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων.

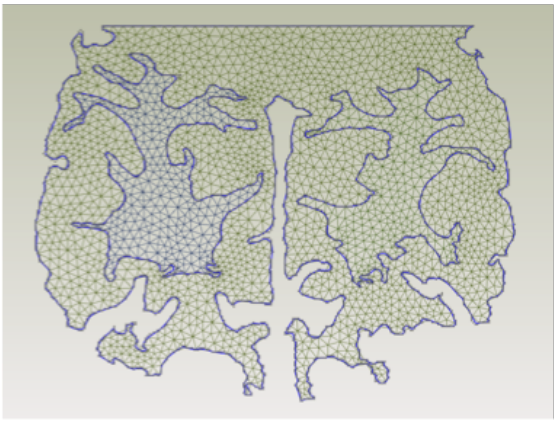


Σχήμα 3: MRI απεικόνιση προβλήματος δοκιμής.

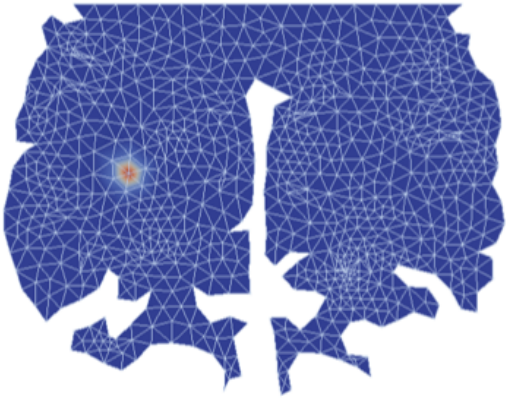
Πιο συγκεκριμένα, θεωρήσαμε το γραμμικό μοντέλο εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου με πεδίο ορισμού μία ενδεικτική τομή υγιούς εγκεφάλου στις δύο διαστάσεις η οποία απεικονίζεται μέσω τεχνικών MRI και επιδεικνύεται στο Σχήμα 3. Αναπτύσσοντας (βλ. Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2014), στη συνέχεια, τεχνικές αναγνώρισης και εντοπισμού των περιοχών φαιάς και λευκής ουσίας (βλ. Σχήμα 4), καθώς και των συνόρων τους, επετεύχθη η διακριτοποίησή τους (βλ. Σχήμα 5) και η επιτυχής εισαγωγή τους στο FEniCS όπως επιδεικνύεται στο Σχήμα 6 μαζί με τυχαία αρχική συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σχήμα 4: Περιοχές φαιάς και λευκής ουσίας διαφορετικού συντελεστή διάχυσης.



Σχήμα 5: Διακριτοποίηση περιοχών διαφορετικού συντελεστή διάχυσης.



Σχήμα 6: Αρχική συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων του προβλήματος δοκιμής.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η αριθμητική υλοποίηση στη πλατφόρμα FeniCS πραγματοποιείται σε γλώσσα python (βλ. Σχήμα 7) και αναφέρεται φυσικά στη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων με γραμμικές βασικές συναρτήσεις η οποία, όσο αφορά τη χρονική διακριτοποίηση, συνοδεύεται από την κλασσική Backward-Euler.

```
from dolfin import *
import numpy as np

# Mesh
mesh = Mesh("m05.xml")
subdomains = MeshFunction('size_t', mesh, "m05_physical_region.xml")
boundaries = MeshFunction('size_t', mesh, "m05_facet_region.xml")
parameters["reorder_dofs_serial"] = False

#plot(boundaries,interactive=True)
#plot(subdomains,interactive=True)

V0 = FunctionSpace(mesh, "DG", 0)
V1 = FunctionSpace(mesh, "CG", 1)

coor = mesh.coordinates()

kappa = Function(V0)
k_values = [ 0.2, 1.0, 1.0]
help = np.asarray(subdomains.array(), dtype=np.int32)
kappa.vector()[:] = np.choose(help, k_values)

#Change initial coordinates using coor[k][0] and coor[k][1] and tumor growth factor
    by alpha
u0 = Expression("(1.0/(alpha*sqrt(pi)))*exp(-(pow(x[0] - 4.733, 2) + pow(x[1] -
    7.877, 2)) / (alpha*alpha))", alpha = 0.1)

u_init = interpolate(u0, V1)
u_init_array = u_init.vector().array()

dt = 0.012

# Define variational problem
u = TrialFunction(V1)
v = TestFunction(V1)
f = Constant(0.0)

a = u*v*dx + dt*kappa*inner(nabla_grad(u), nabla_grad(v))*dx
L = (u_init + dt*f)*v*dx

A = assemble(a)

u = Function(V1)
T = 6
t = dt
u_prev = u_init

while t <= T:
    b = assemble(L)
    solve(A, u.vector(), b)
    plot(u)
    t = t + dt
    u_prev.assign(u)
    L = (u_prev + dt*f)*v*dx

plot(u, interactive=True)
```

Σχήμα 7: Κώδικας python προβλήματος δοκιμής πλατφόρμας FeniCS.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3 Αποτελέσματα

3.1 Επικύρωση της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζουμε τη συμπεριφορά της μεθόδου Φωκά, που αναπτύξαμε στα πλαίσια της Δράσης 2.4, όταν χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλημάτων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Τα μοντέλα που χρησιμοποιούμε είναι γραμμικά στις 1+1 διαστάσεις και ενσωματώνουν πρωτόκολλα θεραπείας.

Πιο συγκεκριμένα, σε όλα τα προβλήματα μοντέλα που ακολουθούν θεωρούμε τα εξής δύο πρωτόκολλα θεραπείας:

- *Πρωτόκολο RP:* Χρησιμοποιείται μόνο ραδιοθεραπεία για ένα συνεχόμενο κύκλο θεραπείας 30 ημερών, ξεκινώντας από την $\bar{T}_G = 180$ ημέρα μέχρι την $\bar{T}_R = 210$ ημέρα. Η συνολική δόση ακτινοθεραπείας είναι 54Gy.
- *Πρωτόκολο RCP:* Χρησιμοποιείται συνδυασμός ακτινοθεραπείας και χημειοθεραπείας. Αρχικά για ένα συνεχόμενο κύκλο θεραπείας 20 ημερών, χρησιμοποιείται μόνο ραδιοθεραπεία ξεκινώντας από την $\bar{T}_G = 180$ ημέρα μέχρι την $\bar{T}_R = 200$ ημέρα. Στη συνέχεια για ένα συνεχόμενο κύκλο θεραπείας 10 ημερών, χρησιμοποιείται ραδιο-χημειοθεραπεία ξεκινώντας από την $\bar{T}_R = 200$ μέρα μέχρι την $\bar{T}_M = 210$ ημέρα. Τέλος, για ένα συνεχόμενο κύκλο θεραπείας 20 ημερών, χρησιμοποιείται μόνο χημειοθεραπεία ξεκινώντας από την $\bar{T}_M = 210$ ημέρα μέχρι την $\bar{T}_N = 230$ ημέρα.

Και στα δύο πρωτόκολλα:

- Η ημερήσια δόση ραδιοθεραπείας ισούται με $d = 1.8$Gy ενώ χρησιμοποιώντας τις παραμέτρους (βλ. [23]) $\alpha = 0.027$, $\beta = 0.0027$, $n = 1$, $\mu = 11.4$, $\tau = 0.0083$, $\Delta\tau = 1$ η σταθερά ραδιοθεραπείας είναι $R_{\text{eff}} = 0.05707849$.
- Η ημερήσια δόση χημειοθεραπείας ισούται με $180\ mg/m^2$ ανά κύκλο των 7 ημερών. Συνεπώς, η τιμή της παραμέτρου k_G (βλ. [23]) υπολογίζεται να ισούται με $k_G = 0.0196$.

Τονίζουμε ότι τα μοντέλα που χρησιμοποιούμε είναι υποθετικά και δεν έχουν σχέση με αληθινά ιατρικά δεδομένα.

3.1.1 Πρόβλημα Εφαρμογής I: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων

Ανακαλώντας το μαθηματικό μοντέλο από τη σχέση (16), για το πρόβλημα εφαρμογής I θεωρούμε τις εξής τιμές των παραμέτρων:

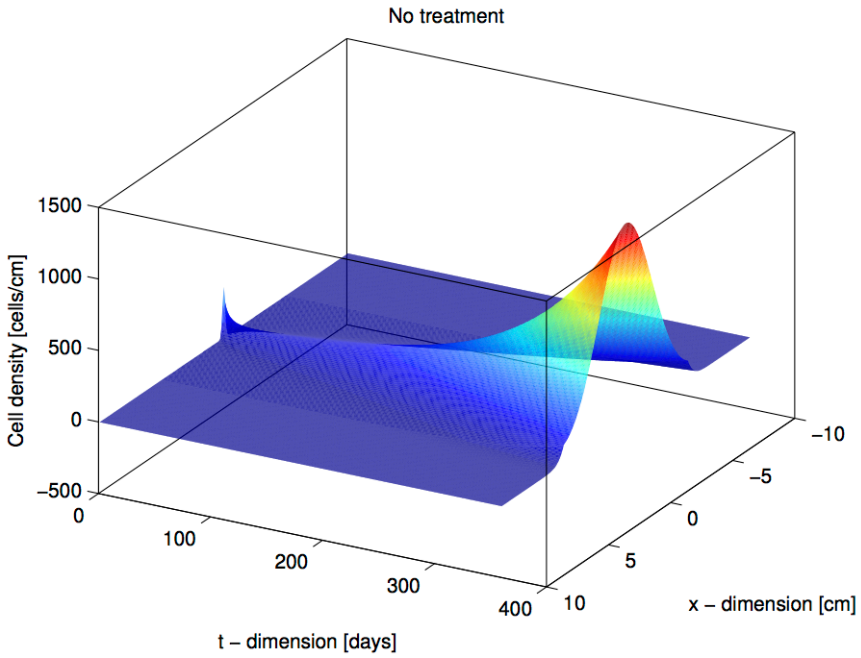
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

$$\begin{cases} \bar{a} = -10 \text{ cm}, \ \bar{b} = 10 \text{ cm}, \ \bar{w}_1 = -5 \text{ cm}, \ \bar{w}_2 = 5 \text{ cm} \\ \bar{\Omega}_g = [\bar{a}, \bar{w}_1) \cup (\bar{w}_2, \bar{b}] \text{ και } \bar{\Omega}_w = [\bar{w}_1, \bar{w}_2] \\ D_g = 0.0013 \text{ cm}^2\text{day}^{-1}, \ D_w = 0.0065 \text{ cm}^2\text{day}^{-1} \\ \bar{\rho} = 0.012 \text{ day}^{-1}, \ N_0 = 100 \text{ cells} \end{cases} \tag{29}$$

Η αρχική κατανομή των κακοηθών κυττάρων δίνεται από:

$$\bar{f}(\bar{x}) = N_0 \delta(\bar{x}).$$

Τα αποτελέσματα από την εφαρμογή της μεθόδου Φωκά συνοψίζονται στα Σχήματα 8-11 που ακολουθούν.

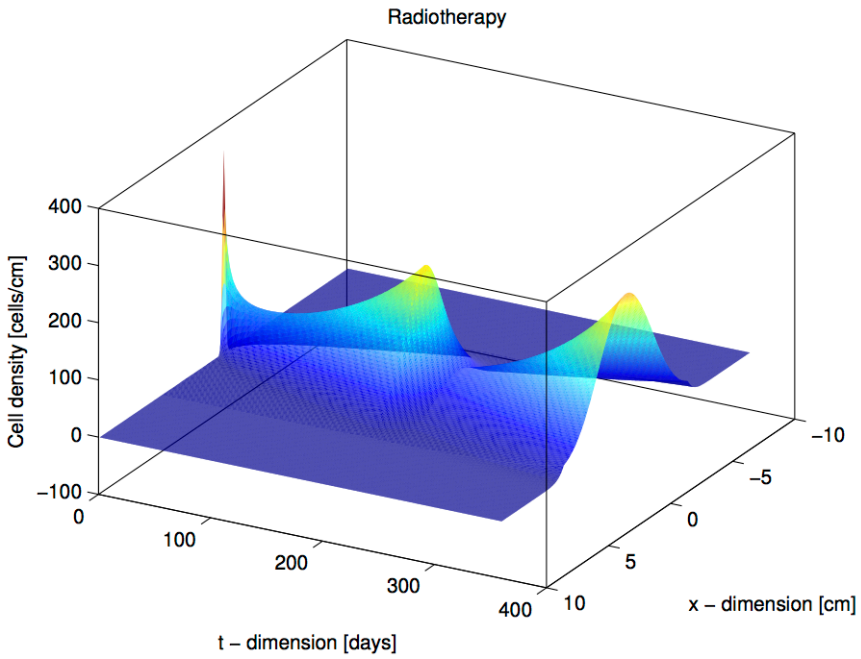


Σχήμα 8: Συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$ άνευ θεραπείας.

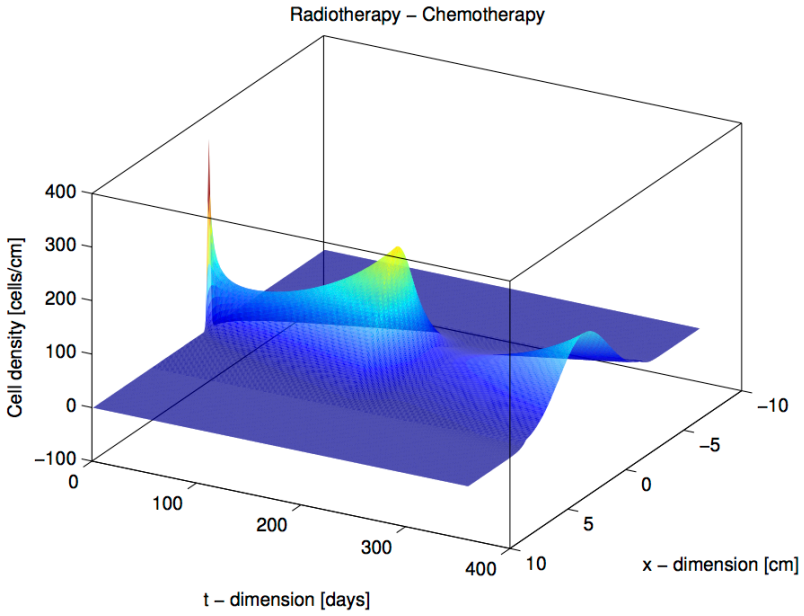
Πιο συγκεκριμένα, στα σχήματα 8-10 απεικονίζεται η χρονική εξέλιξη της πυκνότητας των καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$ υπό τα διαφορετικά πρωτόκολλα θεραπείας για συνολικό χρονικό διάστημα $\bar{T}_F = 365$ ημερών. Παρατηρείστε ότι το πρωτόκολλο RCP θεωρείται το καλύτερο για την θεραπεία. Στο σχήμα 11 φαίνεται ο λόγος

$$\frac{N(\bar{t})}{N_0(\bar{t})}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 9: Συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$ υπό το πρωτόκολλο RP.

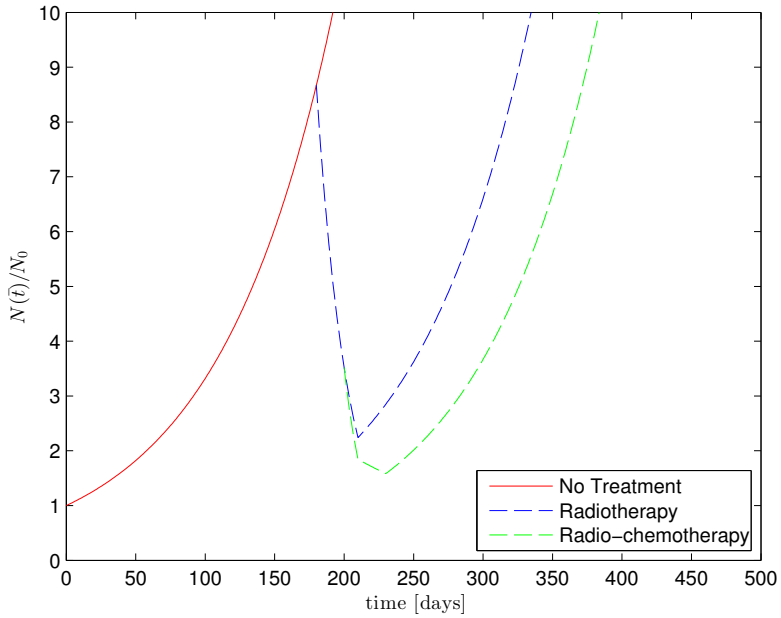


Σχήμα 10: Συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$ υπό το πρωτόκολλο RCP.

του πλήθους των καρκινικών κυττάρων $N(\bar{t})$ προς το πλήθος των αρχικών καρκινικών κυττάρων $N_0(\bar{t})$. Όπως φαίνεται το πρωτόκολλο RP αυξάνει το χρόνο

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

επιβίωσης κατά 190 ημέρες, ενώ το πρωτόκολλο RCP προσθέτει ακόμα 50 ημέρες.



Σχήμα 11: Η επίδραση της ραδιοθεραπείας (μπλε) και του συνδυασμού ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας στο συνολικό αριθμό των καρκινικών κυττάρων.

3.1.2 Πρόβλημα Εφαρμογής II: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις τεσσάρων αρχικών πηγών καρκινικών κυττάρων

Στο πρόβλημα εφαρμογής II θεωρούμε τις εξής παραμέτρους στο μοντέλο (16):

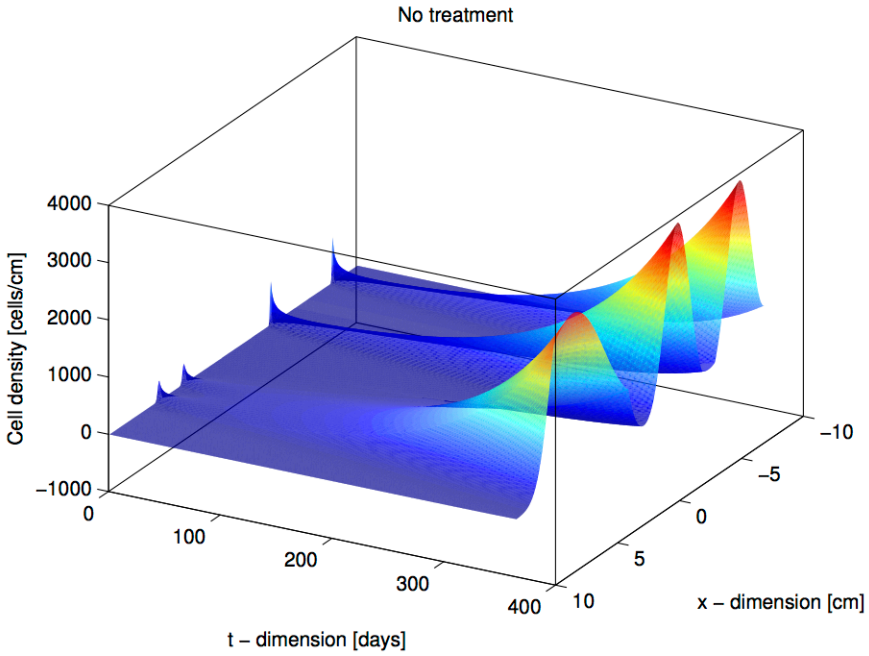
$$\begin{cases} \bar{a} = -10 \text{ cm}, \ \bar{b} = 10 \text{ cm} \\ \bar{w}_1 = -6 \text{ cm}, \ \bar{w}_2 = -5 \text{ cm}, \ \bar{w}_3 = 1 \text{ cm}, \ \bar{w}_4 = 7 \text{ cm} \\ \bar{\Omega}_g = [\bar{a}, \bar{w}_1) \cup (\bar{w}_2, \bar{w}_3) \cup (\bar{w}_4, \bar{b}], \quad \bar{\Omega}_w = [\bar{w}_1, \bar{w}_2] \cup [\bar{w}_3, \bar{w}_4] \\ D_g = 0.0013 \text{ cm}^2\text{day}^{-1}, \ D_w = 0.0065 \text{ cm}^2\text{day}^{-1} \\ \bar{\rho} = 0.012 \text{ day}^{-1}, \ N_0 = 400 \text{ cells} \end{cases} \tag{30}$$

και τέσσερις αρχικές πηγές καρκινικών κυττάρων που περιγράφονται από την

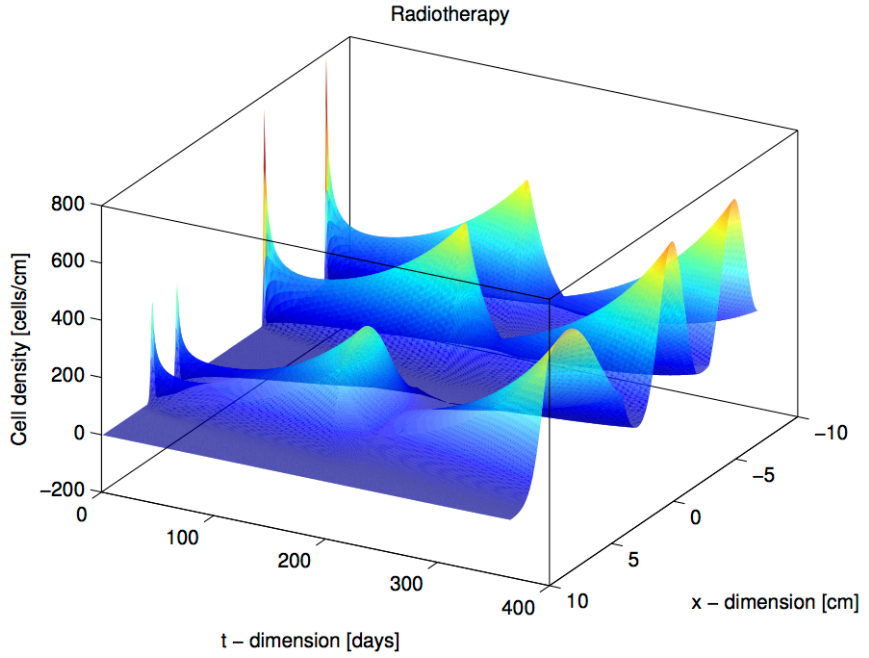
$$\bar{f}(\bar{x}) = \frac{N_0}{4} \left[\delta(\bar{x} + 8) + \delta(\bar{x} + 3) + \delta(\bar{x} - 4) + \delta(\bar{x} - 6) \right].$$

Τα αποτελέσματα συνοψίζονται στα Σχήματα 12-15.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

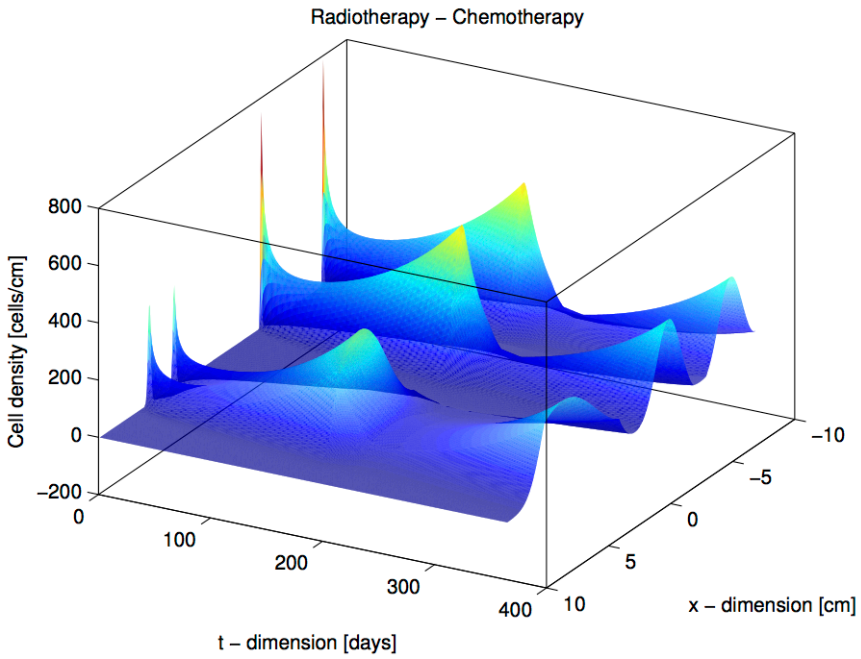


Σχήμα 12: Συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ άνευ θεραπεία.

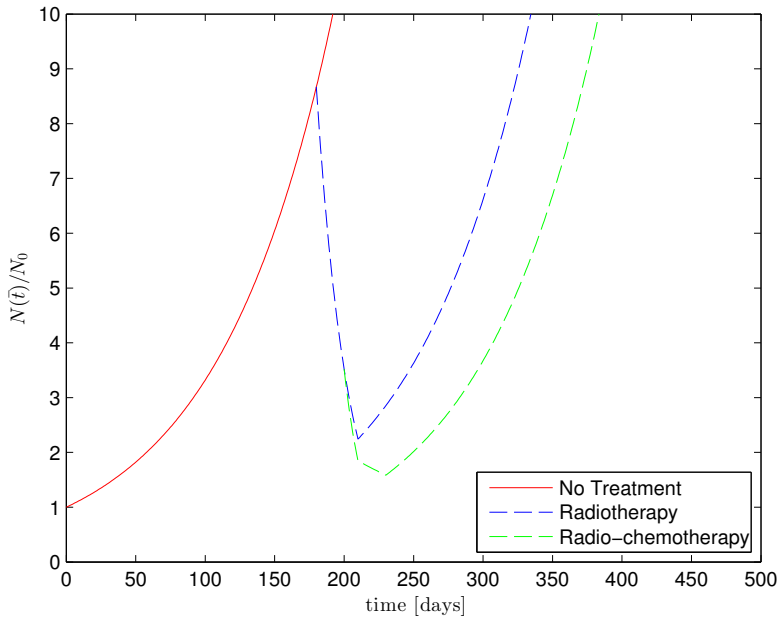


Σχήμα 13: Συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ υπό το πρωτόκολλο RP.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 14: Συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$ υπό το πρωτόκολλο RCP.



Σχήμα 15: Η επίδραση της ραδιοθεραπείας (μπλέ) και του συνδυασμού ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας στο συνολικό αριθμό των καρκινικών κυττάρων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στα σχήματα 12-14 παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ υπό την επίδραση διαφορετικών πρωτοκόλλων θεραπείας για χρονικό διάστημα ενός έτους ($\bar{T}_F = 365$ ημέρες). Τα συμπεράσματα που εξάγονται είναι ανάλογα με αυτά του προβλήματος εφαρμογής Ι.

3.2 Επικύρωση της ασυνεχούς μεθόδου Collocation (dDHC) σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζουμε τη συμπεριφορά της dDHC μεθόδου , που αναπτύξαμε στα πλαίσια της Δράσης 2.1, όταν χρησιμοποιείται για την επίλυση προβλημάτων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Τα μοντέλα που χρησιμοποιούμε είναι γραμμικά στις 1+1 διαστάσεις και μη-γραμμικά στις 1+2 διαστάσεις και ενσωματώνουν πρωτόκολλα θεραπείας.

Σε όλα τα προβλήματα μοντέλα που ακολουθούν εφαρμόζουμε το πρωτόκολλο θεραπείας RCP, που παρουσιάσαμε στην προηγούμενη παράγραφο, με τις ίδιες ημερήσιες δόσεις θεραπείας. Στα προβλήματα Ι και ΙΙ εφαρμόζεται το εξής τροποποιημένο RCP πρωτόκολλο:

- *Πρωτόκολο RCP-1:* Χρησιμοποιείται συνδυασμός ακτινοθεραπείας και χημειοθεραπείας. Αρχικά για ένα συνεχόμενο κύκλο θεραπείας 30 ημερών, χρησιμοποιείται μόνο ραδιοθεραπεία ξεκινώντας από την $\bar{T}_G = 180$ ημέρα μέχρι την $\bar{T}_R = 210$ ημέρα. Στη συνέχεια χρησιμοποιείται χημειοθεραπεία για ένα 6 κύκλους 5 ημερών, ξεκινώντας από την $\bar{T}_R \equiv \bar{T}_M = 210$. Κάθε κύκλος ακολουθείται από ένα διάστημα 23 ημερών αποθεραπείας.

ενώ στο πρόβλημα ΙΙΙ το RCP-2 πρωτόκολλο επιδεικνύεται στο Σχήμα 20.

3.2.1 Πρόβλημα Εφαρμογής Ι: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων

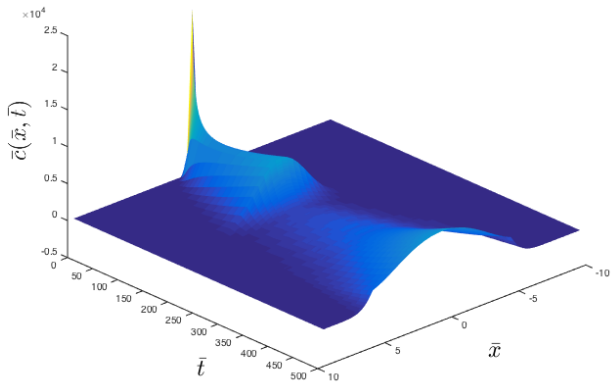
Για το μαθηματικό μοντέλο της σχέσης (16), το πρόβλημα εφαρμογής Ι θεωρεί μία αρχική πηγή καρκινικών κυττάρων με κέντρο το $\bar{x} = 0$ και τις εξής τιμές των παραμέτρων:

$$\begin{cases} \bar{a} = -10 \text{ cm},\ \bar{b} = 10 \text{ cm},\ \bar{w}_1 = -6 \text{ cm},\ \bar{w}_2 = 8 \text{ cm} \\ \bar{\Omega}_g = [\bar{a}, \bar{w}_1) \cup (\bar{w}_2, \bar{b}] \text{ και } \bar{\Omega}_w = [\bar{w}_1, \bar{w}_2] \\ D_g = 0.0013 \text{ cm}^2\text{day}^{-1},\ D_w = 0.0065 \text{ cm}^2\text{day}^{-1} \\ \bar{\rho} = 0.012 \text{ day}^{-1}\ ,\ N_0 = 2 \times 10^4 \text{ cells} \end{cases}.$$

Τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης συνοψίζονται στα Σχήματα 16 και 17, καθώς και στον Πίνακα Ι.

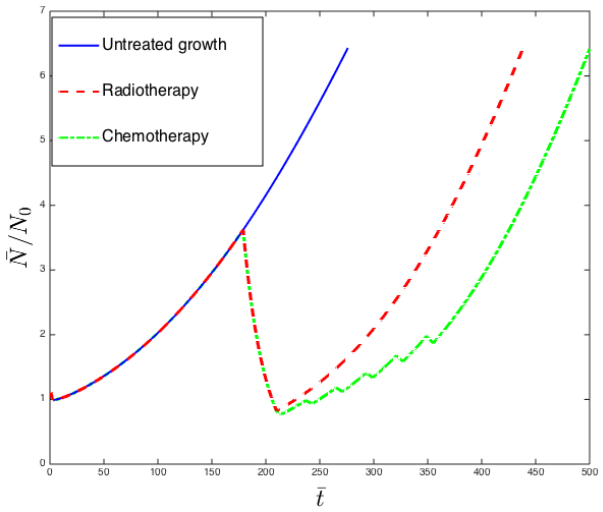
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ειδικότερα στο Σχήμα 16 επιδεικνύεται η εξέλιξη της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$. Μπορεί κανείς εύκολα να αναγνωρίσει τις περιόδους όπου η συγκέντρωση καρκινικών κυττάρων εξελίσσεται με ή χωρίς την εφαρμογή πρωτοκόλλου θεραπείας.



Σχήμα 16: Η χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$

Η επίδραση του RCP-1 πρωτοκόλλου θεραπείας στον συνολικό αριθμό των καρκινικών κυττάρων $\bar{N}(\bar{t})/N_0$, όπου $N(\bar{t}) = \int_{\bar{a}}^{\bar{b}} \bar{c}(\bar{x},\bar{t})d\bar{x}$, επιδεικνύεται στο Σχ. 17.



Σχήμα 17: Η επίδραση του RCP-1 πρωτοκόλλου θεραπείας στον συνολικό αριθμό των καρκινικών κυττάρων.

Τέλος, στον Πίνακα Ι συνοψίζεται η απόδοση της μεθόδου dDHC-IMEX, όπου κανείς μπορεί επιδεικνύεται αριθμητικά η 4η τάξη σύγκλισης (Τ.Σ.) της dDHC μεθόδου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας I: Απόδοση της dDHC-IMEX μεθόδου

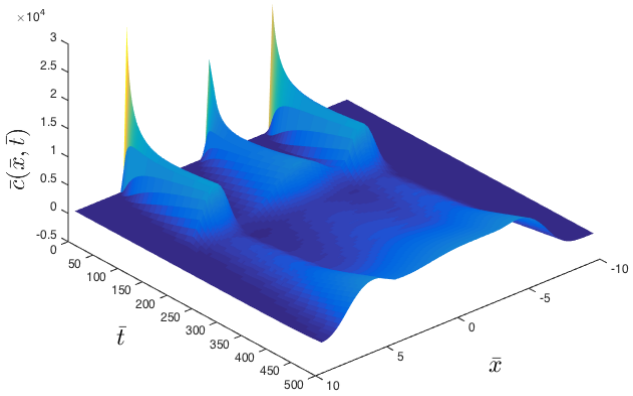
h	Σφάλμα	Τ.Σ.	Χρόνος (sec)
$1/8$	3.5687e-06	-	0.24
$1/16$	2.3357e-07	3.93	0.30
$1/32$	1.4760e-08	3.98	0.42
$1/64$	9.2474e-10	3.99	0.88
$1/128$	5.6156e-11	4.04	1.55

3.2.2 Πρόβλημα Εφαρμογής II: Γραμμικό μοντέλο στις 1+1 διαστάσεις τριών αρχικών πηγών καρκινικών κυττάρων

Για το πρόβλημα εφαρμογής II, με τρεις αρχικές πηγές καρκινικών κυττάρων, θεωρούμε τις εξής τιμές των παραμέτρων του μοντέλου της σχέσης (16):

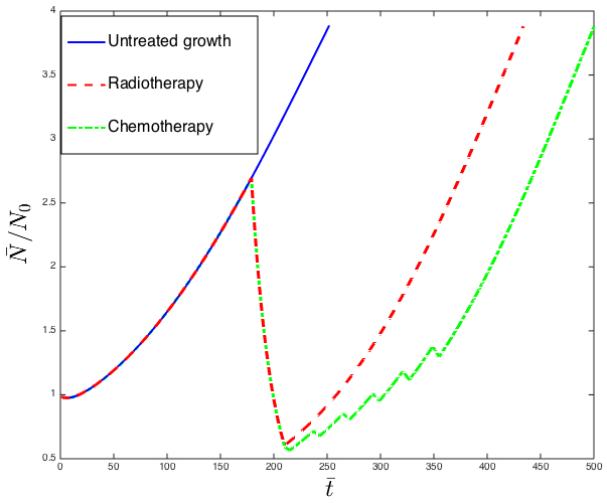
$$\begin{cases} \bar{a} = -10 \text{ cm}, \ \bar{b} = 10 \text{ cm}, \ \bar{w}_1 = -4 \text{ cm}, \ \bar{w}_2 = 6 \text{ cm} \\ \bar{\Omega}_g = [\bar{a}, \bar{w}_1) \cup (\bar{w}_2, \bar{b}] \text{ and } \bar{\Omega}_w = [\bar{w}_1, \bar{w}_2] \\ D_g = 0.0013 \text{ cm}^2\text{day}^{-1}, \ D_w = 0.0065 \text{ cm}^2\text{day}^{-1} \\ \bar{\rho} = 0.012 \text{ day}^{-1} \ , \ N_0 = 2 \times 10^4 \text{ cells} \end{cases}$$

Τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης συνοψίζονται στα Σχήματα 18 και 19 καθώς και στον Πίνακα II, και είναι ανάλογα με αυτά του προηγούμενου προβλήματος εφαρμογής I.



Σχήμα 18: Η χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων $\bar{c}(\bar{x}, \bar{t})$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 19: Η επίδραση του RCP-1 πρωτοκόλλου θεραπείας στον συνολικό αριθμό των καρκινικών κυττάρων

Πίνακας II: Απόδοση της dDHC-IMEX μεθόδου

h	Σφάλμα	Τ.Σ.	Χρόνος (sec)
$1/8$	5.3380e-06	-	0.22
$1/16$	3.4585e-07	3.94	0.28
$1/32$	2.1802e-08	3.98	0.40
$1/64$	1.3655e-09	3.99	0.90
$1/128$	8.5010e-11	4.00	1.52

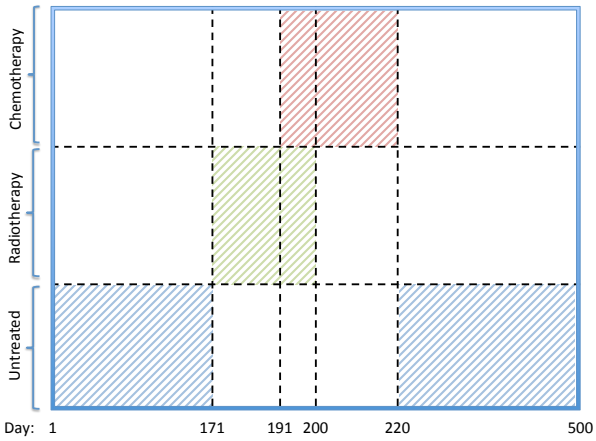
3.2.3 Πρόβλημα Εφαρμογής ΙΙΙ: Μη-Γραμμικό μοντέλο στις 1+2 διαστάσεις μίας αρχικής πηγής καρκινικών κυττάρων

Ανακαλώντας τις σχέσεις (25)-(26), το πρόβλημα εφαρμογής ΙΙΙ, με μία αρχική πηγή καρκινικών κυττάρων στο σημείο $(x, y) = (0, 2.25)$, έχει τη μορφή:

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) - R(c) - G(c) \ , \ (x,y) \in [-3,3]^2 \ , \ t \leq 6 \\ \dfrac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \\ c(x,y,0) = f(x,y) = \delta(x, y - 2.25) \end{cases}$$

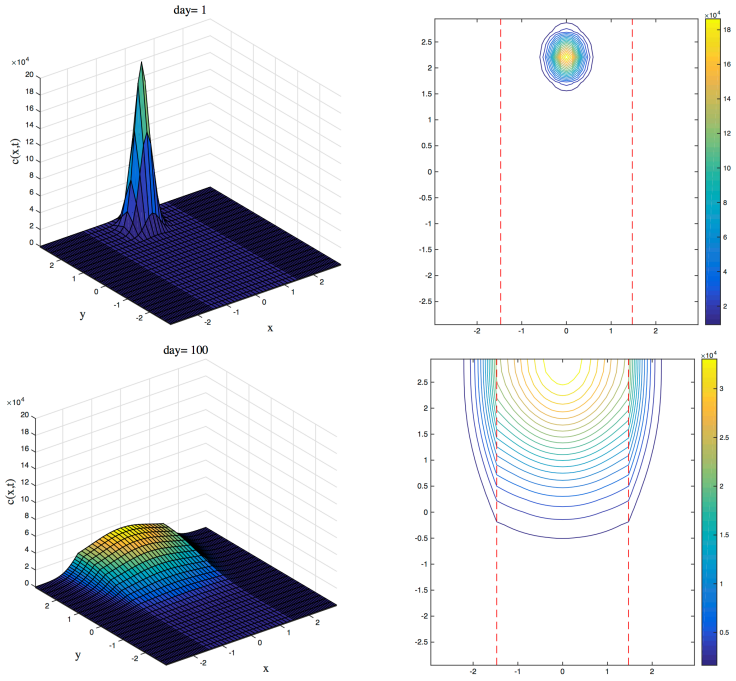
ενώ το πρωτόκολλο θεραπείας RCP-2 επιδεικνύεται γραφικά στο Σχήμα 20.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 20: Το RCP-2 πρωτόκολλο θεραπείας.

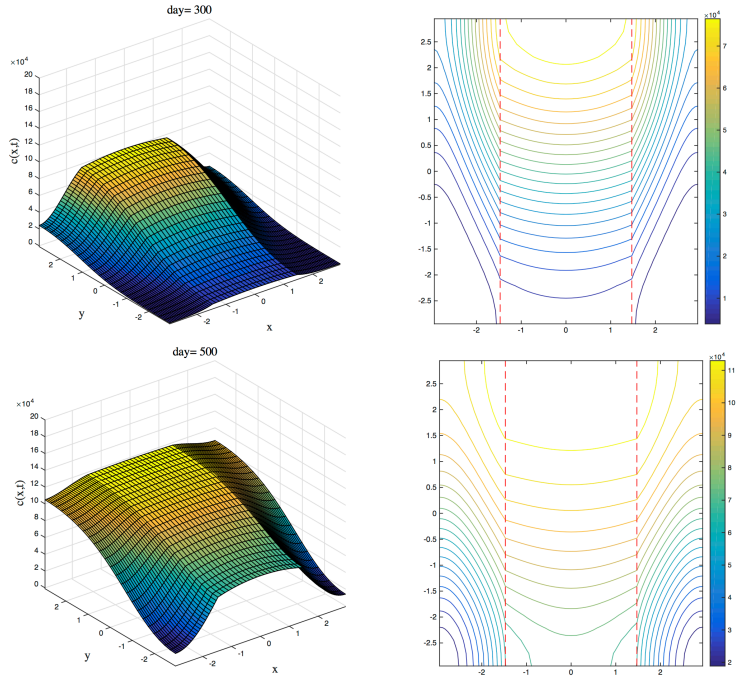
Τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης συνοψίζονται στα Σχήματα 21-24 καθώς και στον Πίνακα III. Πιο συγκεκριμένα, το Σχήμα 21 περιλαμβάνει δύο στιγμιότυπα από την χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων κατά την 1η και 100η ημέρα. Και στα δύο στιγμιότυπα η νόσος εξελίσσεται άνευ θεραπείας.



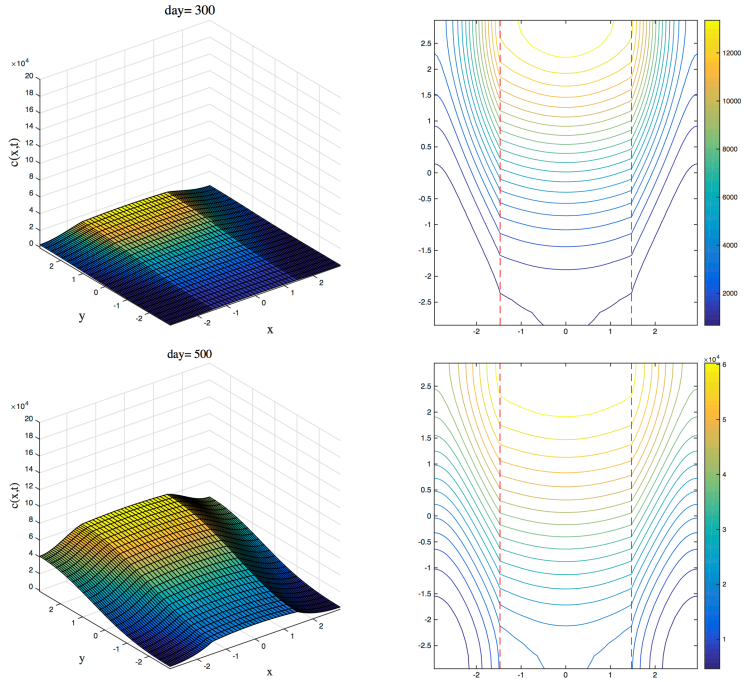
Σχήμα 21: Συγκέντρωση $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ άνευ θεραπείας κατά την 1η και 100η ημέρα.

Για την καλλίτερη κατανόηση της επίδρασης των όρων θεραπείας, σύμφωνα με

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



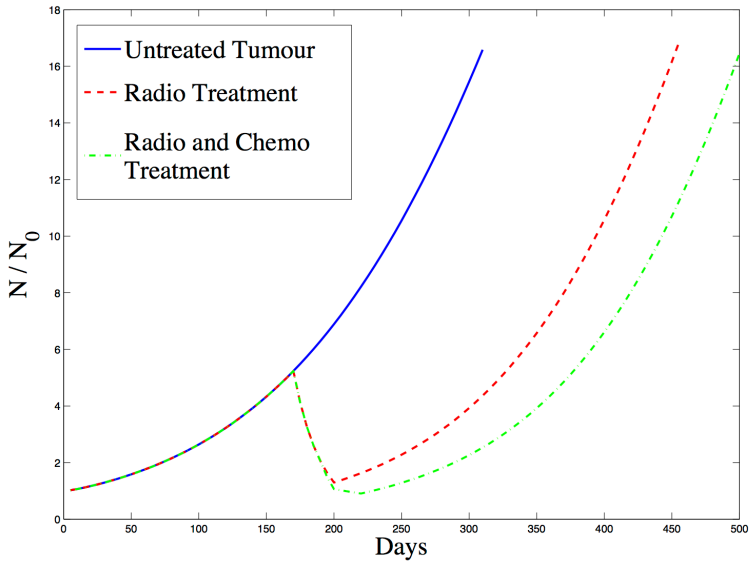
Σχήμα 22: Χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ άνευ θεραπείας.



Σχήμα 23: Χρονική εξέλιξη της συγκέντρωση $\bar{c}(\bar{x},\bar{t})$ με RCP-2 θεραπεία.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

το πρωτόκολλο RCP-2 παραθέτουμε τα Σχήματα 22 και 23. Και τα δύο σχήματα περιλαμβάνουν δύο στιγμιότυπα από την χρονική εξέλιξη της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων κατά την 300η και 500η ημέρα. Στο Σχήμα 22 απεικονίζεται η εξέλιξη της νόσου χωρίς θεραπεία σε αντιδιαστολή με το Σχήμα 23 όπου απεικονίζεται η εξέλιξη της νόσου με εφαρμογή του πρωτοκόλλου θεραπείας RCP-2. Αναλυτικότερα συγκριτικά συμπεράσματα, σε σχέση με την απόδοση διαφορετικών πρωτοκόλλων θεραπείας, μπορεί κανείς να εξάγει παρατηρώντας το Σχήμα (24) που ακολουθεί.



Σχήμα 24: Συγκριτικό διάγραμμα για το μοντέλο με θεραπεία και χωρίς θεραπεία.

Σε σχέση δε με την απόδοση της dDHC-IMEX μεθόδου παραθέτουμε τον Πίνακα III όπου βεβαιώνεται αριθμητικά η 4η τάξη σύγκλισης (Τ.Σ.) της μεθόδου.

Πίνακας III: Απόδοση της dDHC-IMEX μεθόδου

$h_x = h_y$	Σφάλμα	Τ.Σ.	Χρόνος (sec)
$1/4$	4.8857e-03	-	1.74
$1/8$	2.5397e-05	7.5877	9.05
$1/16$	1.9079e-06	3.7347	64.77
$1/32$	1.1629e-07	4.0361	480.96
$1/64$	7.7066e-09	3.9155	4190.50

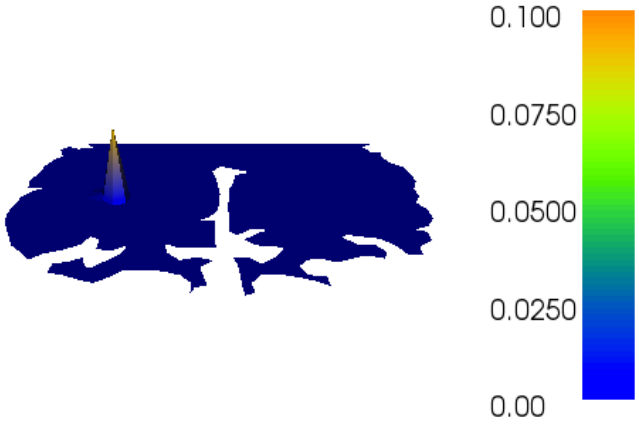
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.3 Επικύρωση Εξέλιξης Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου με χρήση Απεικονίσεων MRI και Πλατφόρμας FeniCS

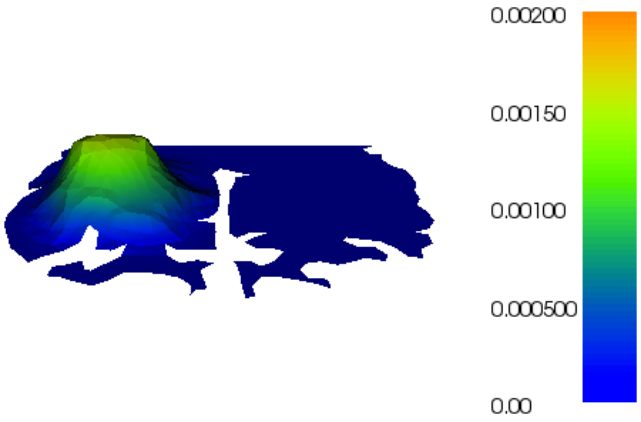
Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, για την εξέλιξη καρκινικών όγκων εγκεφάλου στην πλατφόρμα FeniCS, χρησιμοποιούμε το γραμμικό μοντέλο εκθετικής εξέλιξης. Τα αποτελέσματα της αριθμητικής προσομοίωσης, με την μέθοδο Galerkin (Πεπερασμένα Στοιχείων) και γραμμικά στοιχεία, αναφέρονται στην απεικόνιση της αδιάστατης συνάρτησης

$$u(x,t) = e^{-\rho t} c(x,t)$$

και περιλαμβάνονται στα σχήματα που ακολουθούν και αφορούν στιγμιότυπα της $u(x,t)$ κατά τις χρονικές στιγμές t =1,2,3, και 4 (περίπου ένα έτος).

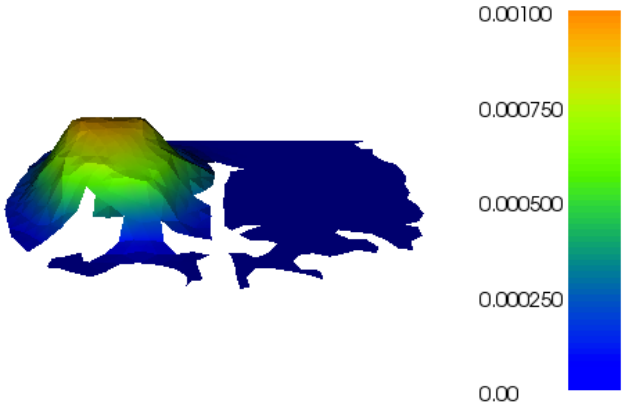


Σχήμα 25: Η αρχική συνθήκη ($t = 0$) του προβλήματος δοκιμής.

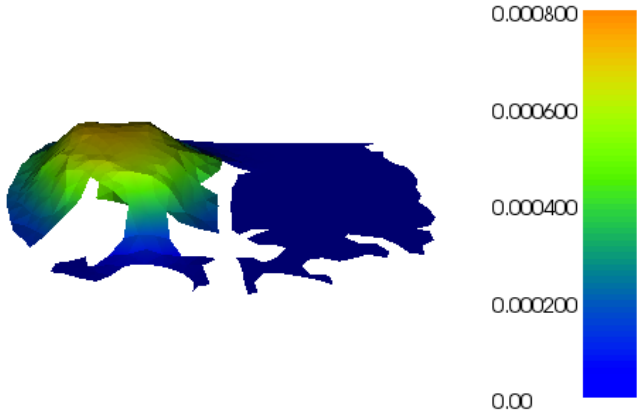


Σχήμα 26: Η λύση του προβλήματος δοκιμής τη χρονική στιγμή $t = 1$.

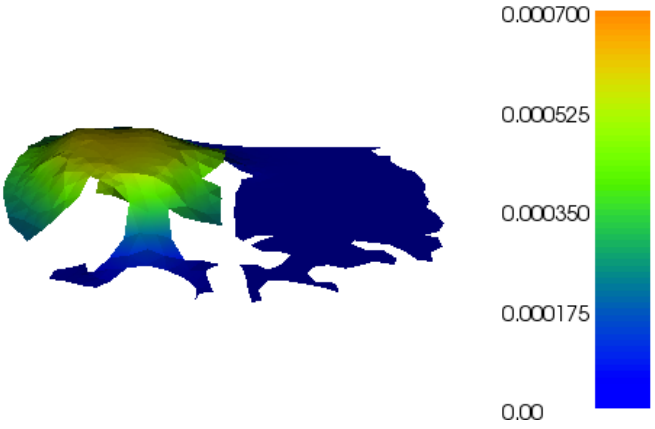
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 27: Η λύση του προβλήματος δοκιμής τη χρονική στιγμή $t = 2$.



Σχήμα 28: Η λύση του προβλήματος δοκιμής τη χρονική στιγμή $t = 3$.



Σχήμα 29: Η λύση του προβλήματος δοκιμής τη χρονική στιγμή $t = 4$.

4 Παραδοτέα

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Τρία (3) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές (εκ των οποίων ένα έχει λάβει βραβείο καλύτερης δημοσίευσης):
  - IE Athanasakis , EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012133.
  - AG Sifalakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *The Unified Transform for a Reaction-Diffusion Brain Tumor Model that Incorporates Tissue Heterogeneity and Radiotherapy*, Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 137-142, 2015
  - IE Athanasakis, ND Vilanakis and EN Mathioudakis, *Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

  Άλλες εργασίες που αφορούν σε προβλήματα εξέλιξης καρκινικών όγκων έχουν παραδοθεί ως παραδοτέα άλλων δράσεων.
- Λογισμικό επαλήθευσης και εφαρμογής των μεθόδων.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από την ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, επ.καθ. Ε. Μαθιουδάκη, Δρ. Σηφαλάκη Αναστάση, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη, υπ.δρ. Ι. Αθανασάκη, υπ.δρ. Ν. Βιλανάκη , υπ.δρ. Π. Στρατή, καθώς και σε συνεργασία με τον καθηγητή Α. Φωκά και ιατρική ομάδα του Ναυτικού Νοσοκομείου Χανίων.

Αναφορές

[1] Μ. Ασβεστάς, Ε. Π. Παπαδοπούλου, Α. Γ. Σηφαλάκης, και Ι. Γ. Σαριδάκης, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with*

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Discontinuous Time Dependent Parameters, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015.

[2] Akrivis G *Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations*, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012

[3] R. Alexander ”Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE’s”, *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.

[4] I. E. Athanasakis, E. P. Papadopoulou and Y. G. Saridakis, *Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation*, Journal of Physics: Conference Series, 490, 012133, 2014.

[5] I.E. Athanasakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation*, Procs WCE-ICAEM 2015, pp. 137-142, London, U.K.

[6] I.E. Athanasakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Discontinuous Hermite Collocation and IMEX Runge-Kutta for a Treated Quasi-linear Heterogeneous Brain Tumor Model*, Procs INASE-PMAMCM 2015, Recent Advances in Mathematics, pp. 183-188, Zakynthos, Greece

[7] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. “The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas”, *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology* , vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.

[8] J.C. Butcher ”Implicit Runge-Kutta processes”, *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.

[9] J.C.Butcher ”The numerical analysis of ordinary differential equations ,” *John Wiley* , 1987.

[10] Cherniha R and Dutka V *Exact and Numerical Solutions of the Generalized Fisher Equation*, Reports on Mathematical Physics, **47**, 393-412, 2001

[11] J. Cook, D. E. Woodward, P. Tracqui and J. D. Murray, *Resection of gliomas and life expectancy*, J Neurooncol., 24, 131, 1995.

[12] M. Crouzeix ”Sur l’approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par desmethodes de Runge Kutta”, *PhD Thesis*, University Paris VI, Paris, 1975.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[13] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. ”The modeling of diffusive tumours,” *Journal of Biological Systems* , vol.3, pp.937-945, 1995.

[14] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006

[15] Fisher RA *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugen., **7**, 255-369, 1937

[16] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001

[17] Gottlieb S and Shu CW *Total variation diminishing Runge-Kutta schemes*, Mat. Comp., **67**, 73-85, 1998

[18] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS *Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem*, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., **1(6)**, 1-25, 1937

[19] Hairer E *Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations*, Numer. Math., **35**, 57-68, 1980

[20] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989

[21] Murray JD *Mathematical Biology*, Springer, Berlin, 1989

[22] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010

[23] G. Powathil, M. Kohandel, S. Sivaloganathan, A. Oza and M. Milosevic, *Mathematical modeling of brain tumors: effects of radiotherapy and chemotherapy*, Phys. Med. Biol. 52 :3291-3306, 2007.

[24] R. Rockne, E. C. Alvord Jr., J. K. Rockhill and K. R. Swanson, *A mathematical model for brain tumor response to radiation therapy*, J. Math. Biol., 58, 561–578, 2009.

[25] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002

[26] Schmitt B *Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations*, BIT, **28**, 884-897, 1988

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[27] Shu CW *Total-variation-diminishing time discretizations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **9**, 1073-1084, 1988

[28] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988

[29] Α. Γ. Σηφαλάκης, Μ. Γ. Παπαδομανωλάκη, Ε. Π. Παπαδοπούλου και Ι. Γ. Σαριδάκης, *The Unified Transform for a Reaction - Diffusion Brain Tumor Model that Incorporates Tissue Heterogeneity and Radiotherapy*, Proceedings of the 2015 International Conference on Pure Mathematics, Applied Mathematics and Computational Methods, 137-142, 2015.

[30] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.

[31] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.

[32] K.R.Swanson,C.Bridge,J.D.Murray and E.C.Alvord Jr " Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.

[33] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.

[34] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr."A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection," *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.

[35] *http://www.fenicsproject.org*.

[36] Logg, Anders, Mardal, Kent-Andre, Wells, Garth *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*,Lecture Notes in Computational Science and Engineering, (84), Springer, 2012.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Θ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED - MIS 379416)

Δράση 4.3

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **4**
1.1 Στοχασική Βελτιστοποίηση ALOPEX για Αναλυτικά Μοντέλα Παράκτιων Υδροφορέων 4
1.2 Συνδυασμός ALOPEX με πλατφόρμες PTC και FEniCS και τη μέθοδο HC για δεδομένα πεδίου. 5

2 Μεθοδολογία **6**
2.1 Στοχασική Βελτιστοποίηση ALOPEX για Αναλυτικά Μοντέλα Παράκτιων Υδροφορέων 6
2.1.1 Υφαλμύριση παράκτιων υδροφορέων 6
2.1.2 Οι εξισώσεις του μαθηματικού μοντέλου 7
2.1.3 Αναλυτική λύση 8
2.1.4 Διαδικασία στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX 9
2.1.5 ALOPEX βελτιστοποίηση με χρήση περιορισμών 10
2.1.6 Κριτήρια Τερματισμού 11
2.1.7 Αριθμητικές προσομοιώσεις - Αποτελέσματα 11
2.2 Συνδυασμός ALOPEX με πλατφόρμα PTC για δεδομένα πεδίου. 13
2.2.1 PTC - Princeton Transport Code 13
2.2.2 Περιοχή μελέτης και αριθμητική μοντελοποίηση 14
2.2.3 Διαδικασία βελτιστοποίησης διαχείρισης αντλήσεων . . . 16
2.2.4 Στρατηγικές ασφάλειας 16
2.2.5 ALOPEX βελτιστοποίηση με χρήση περιορισμών 17
2.2.6 Αριθμητικές προσομειώσεις 18
2.2.7 Αποτελέσματα ALOPEX/PTC διαχείρισης υδροφορέα Χερσονήσου 21
2.3 Συνδυασμός ALOPEX με πλατφόρμα FEniCS για δεδομένα πεδίου. 22
2.3.1 Υδροφορέας Καλύμνου 22
2.3.2 Υδροφορέας Χερσονήσου Κρήτης 23
2.3.3 Αλγόριθμος σχεδίασης μετώπου υφαλμύρισης 24
2.3.4 Αποτελέσματα ALOPEX/FEniCS διαχείρισης υδροφορέα Καλύμνου 25
2.3.5 Αποτελέσματα ALOPEX/FEniCS διαχείρισης υδροφορέα Χερσονήσου Κρήτης 29
2.4 Αποτελέσματα ALOPEX/Collocation διαχείρισης υδροφορέα Καλύμνου 31
2.4.1 Hermite Collocation 31
2.4.2 Αριθμητικές προσομοιώσεις και αποτελέσματα 33

3 Μελλοντικές Δράσεις **35**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

4 Παραδοτέα 35

5 Συνεργασίες 36

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Η διείσδυση υφάλμυρου ύδατος στο εσωτερικό ενός υδροφορέα (φαινόμενο υφαλμύρισης) συνιστά σημαντική απειλή για την ποιότητα των υπόγειων αποθεματικών γλυκού νερού σε παράκτιες περιοχές. Πρόκειται για φαινόμενο, το μέγεθος του οποίου ενισχύεται κατά τους καλοκαιρινούς μήνες, κυρίως στις περιοχές με αυξημένο τουρισμό, με ιδιαίτερα αρνητικές οικονομικές συνέπειες.

Με στόχο την προστασία των αποθεματικών των παράκτιων υδροφορέων και το σχεδιασμό μιας στρατηγικής αειφόρου διαχείρισης του νερού σε αυτούς, οι ερευνητές έχουν επικεντρωθεί στη συνδυασμένη χρήση μαθηματικών μοντέλων με αριθμητικές προσομοιώσεις και αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας στο σημαντικό αυτό περιβαλλοντικό πρόβλημα, αφετέρου δε την ανάπτυξη αλγορίθμων στοχαστικής βελτιστοποίησης και μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης παράκτιων υδροφορέων. Στα πλαίσια αυτά, κύριοι άξονες των ερευνητικών αποτελεσμάτων κατά τη διάρκεια του έργου απετέλεσαν οι:

- Ανάπτυξη/προσαρμογή και μελέτη συμπεριφοράς του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης Algorithm of Pattern Extraction (ALOPEX) για βέλτιστη διαχείριση της άντλησης από παράκτιους υδροφορείς,
- Συνδυασμός του αλγορίθμου ALOPEX αφενός μεν με τις πλατφόρμες λογισμικού PTC και FEniCS, αφετέρου δε με την μέθοδο collocation HC (Δράση 2.1), με στόχο την ολοκληρωμένη αριθμητική διαχείριση του προβλήματος διείσδυσης υφάλμυρου νερού σε παράκτιους υδροφορείς και ιδιαίτερα των υδροφορέων της Χερσονήσου Ηρακλείου Κρήτης και του Βαθέως Καλύμνου.

1.1 Στοχασική Βελτιστοποίηση ALOPEX για Αναλυτικά Μοντέλα Παράκτιων Υδροφορέων

Η βέλτιστη διαχείριση της άντλησης από παράκτιους υδροφορείς, ώστε μπορούν να αποδώσουν το μέγιστο δυνατό όγκο γλυκού νερού χωρίς τον κίνδυνο διείσδυσης υφάλμυρου νερού, αποτελεί θεμελιώδες στοιχείο για την αντιμετώπιση του προβλήματος της υφαλμύρισής τους. Με την συνδρομή αναλυτικών μοντέλων μαθηματικής περιγραφής της ροής του νερού σε ορθογώνιους υπόγειους παράκτιους υδροφορείς αναπτύξαμε και μελετήσαμε μία νέα μορφή του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX καθώς και ενός πλήρους συστήματος κυρώσεων για την επιβολή των περιοριστικών συνθηκών του προβλήματος.

Στην κατεύθυνση αυτή οι ερευνητικοί μας στόχοι εξειδικεύονται ως εξής:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Εισαγωγή μίας νέας αντικειμενικής συνάρτησης κόστους, ικανής να συνδυάζεται με διαδικασίες feedback.
- Ανάπτυξη μίας νέας μορφής του αλγορίθμου ALOPEX με μεταβλητές παραμέτρους.
- Βελτιστοποίηση των παραμέτρων του αλγορίθμου ALOPEX ώστε να επιταχυνθεί η σύγκλισή του.
- Κατασκευή ενός αποτελεσματικού συστήματος *penalty* για τον έλεγχο εξέλιξης της διαδικασίας βελτιστοποίησης ALOPEX.
- Κατασκευή κριτηρίων τερματισμού της διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Η συμπεριφορά και η αποδοτικότητα της νέας αυτής διαδικασίας βελτιστοποίησης διερευνήθηκαν διεξοδικά μέσα από την εξέταση ενός πλήθους σεναρίων άντλησης και καιρικών συνθηκών, σε έναν υδροφορέα ορθογώνιας γεωμετρίας που προσομοιώνει έναν πραγματικό υδροφορέα στην περιοχή Βαθύ Καλύμνου.

1.2 Συνδυασμός ALOPEX με πλατφόρμες PTC και FEniCS και τη μέθοδο HC για δεδομένα πεδίου.

Με στόχο την επικύρωση μεθόδων και λογισμικού καθώς και τη μελέτη της συμπεριφοράς τους σε δεδομένα πεδίου συνδυάσαμε την μέθοδο στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX με:

- την πλατφόρμα λογισμικού PTC (Princeton Transport Code) με εφαρμογή στον παράκτιο υδροφορέα της Χερσονήσου στο Ηράκλειο Κρήτης.
- την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS με εφαρμογή σε ομογενείς και ετερογενείς ορθογώνιες προσεγγίσεις του παράκτιου υδροφορέα στην περιοχή Βαθύ Καλύμνου αλλά και δισδιάστατες προσεγγίσεις του παράκτιου υδροφορέα της Χερσονήσου στο Ηράκλειο Κρήτης.
- την μέθοδο HC με εφαρμογή σε ομογενείς και ετερογενείς προσεγγίσεις του παράκτιου υδροφορέα στην περιοχή Βαθύ Καλύμνου.

Επισημαίνουμε ότι για την προστασία των υδροφορέων αναπτύσσονται κατάλληλες στρατηγικές ελέγχου του μετώπου υφαλμύρισης και διατήρησής του σε απόσταση ασφαλείας από οριοθετημένες περιοχές γύρω από κάθε γεώτρηση.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

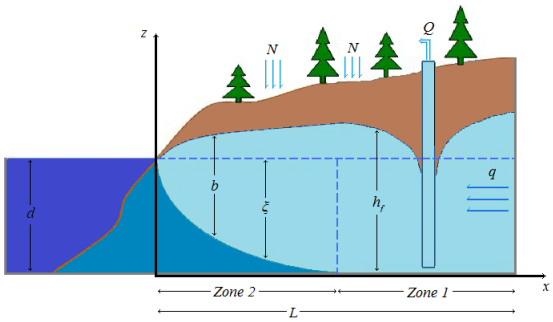
2 Μεθοδολογία

2.1 Στοχασική Βελτιστοποίηση ALOPEX για Αναλυτικά Μοντέλα Παράκτιων Υδροφορέων

2.1.1 Υφαλμύριση παράκτιων υδροφορέων

Η ροή του νερού στο εσωτερικό ενός υδροφορέα είναι μια σύνθετη διαδικασία, καθώς συνυπάρχουν δύο διαφορετικές καταστάσεις του νερού, με υδραυλικές ιδιότητες που εμφανίζουν μεγάλη διακύμανση κατά μήκος του υδροφορέα. Στην παρούσα εργασία ακολουθούμε τη μοντελοποίηση που συναντάμε στο [15], η οποία βασίζεται:

- στην προσέγγιση Sharp Interface, δηλαδή δεχόμαστε ότι δεν υπάρχει απευθείας ανάμειξη γλυκού και αλμυρού νερού στο εσωτερικό του υδροφορέα
- στην εξίσωση των Ghyben-Herzberg, δηλώνοντας έτσι ότι η ροή του νερού προσεγγίζει την steady state κατάσταση.



Σχήμα 1: Παράκτιος υδροφορέας γλυκού νερού. Παράμετροι μοντελοποίησης.

Πιο αναλυτικά, η sharp interface είναι μια υδραυλική προσέγγιση, όπου μόνο οι τιμές της υδραυλικής κεφαλής στην περιοχή του υδροφορέα απαιτούνται για τον υπολογισμό της έκτασης της υφάλμυρης εισβολής, σε αντίθεση με άλλες προσεγγίσεις που χρησιμοποιούν μετρήσεις χλωριούχων αλάτων ή μετρήσεις ηλεκτρικής αγωγιμότητας. Η κύρια υπόθεση είναι ότι η ζώνη ανάμιξης μεταξύ των δύο μη αναμίξιμων υγρών (φρέσκο και αλατούχο νερό), τα οποία έχουν διαφορετικές πυκνότητες, περιορίζεται σε μια περιοχή μικρού πλάτους. Η θέση της απότομης περιοχής αυτής μεταξύ των δύο ρευστών, καθορίζεται από τη διαφορά των τιμών των υδραυλικών κεφαλών μεταξύ του υφάλμυρου και του γλυκού νερού καθώς από τον όγκο του γλυκού νερού που ρέει προς την ακτογραμμή από

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

το εσωτερικό της χώρας (βλέπε [26]). Η θέση του υφάλμυρου μετώπου προσεγγίζεται χρησιμοποιώντας τη σχέση των Ghyben-Herzberg:

$$h_f - d = \delta\,\xi \quad , \qquad \delta := \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} \approx 0.025 \tag{1}$$

όπου ρ_s και ρ_f δηλώνουν τις πυκνότητες του αλατισμένου και του γλυκού νερού αντίστοιχα.

2.1.2 Οι εξισώσεις του μαθηματικού μοντέλου

Η βασική εξίσωση του μοντέλου είναι η ακόλουθη:

$$\frac{\partial}{\partial x}\big(Kb\frac{\partial h_f}{\partial x}\big) + \frac{\partial}{\partial y}\big(Kb\frac{\partial h_f}{\partial y}\big) + N - Q = 0, \tag{2}$$

όπου το b ικανοποιεί τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} &\text{Zone 1:}\ \ b = h_f, \\ &\text{Zone 2:}\ \ b = h_f - d + \xi. \end{aligned} \tag{3}$$

Το δυναμικό ροής $\phi = \phi(x, y)$ (βλέπε [15, 21]) στο εσωτερικό του υδροφορέα ορίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned} &\text{Zone 1:}\quad \phi = \tfrac{1}{2}\big(h_f^2 - (1+\delta)d^2\big), \\ &\text{Zone 2:}\quad \phi = \tfrac{1+\delta}{2\delta}\big(h_f - d\big)^2, \end{aligned} \tag{4}$$

ενώ στην περιοχή του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας, όπου $\xi = d$:

$$\phi_\tau = \phi(x_\tau, y_\tau) = \frac{(1+\delta)\delta}{2} d^2\ . \tag{5}$$

Το δυναμικό ροής $\phi = \phi(x, y)$ είναι μια συνεχής και ομαλή συνάρτηση κατά μήκος του συνόρου των ζωνών 1 και 2, ικανοποιώντας την εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial x}\big(K\frac{\partial \phi}{\partial x}\big) + \frac{\partial}{\partial y}\big(K\frac{\partial \phi}{\partial y}\big) + N - Q = 0, \tag{6}$$

με Dirichlet συνοριακές συνθήκες $\phi = 0$ κατά μήκος της ακτογραμμής $(x = 0)$ και Neumann συνοριακές συνθήκες $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ στις περιοχές όπου δεν εμφανίζεται εισροή ύδατος στον υδροφορέα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Εάν οι τιμές των παραμέτρων K, N, Q και οι συνοριακές συνθήκες είναι γνωστές, η προηγούμενη εξίσωση μπορεί να επιλυθεί ως προς $\phi(x,y)$, χρησιμοποιώντας αναλυτικές ή αριθμητικές μεθόδους.

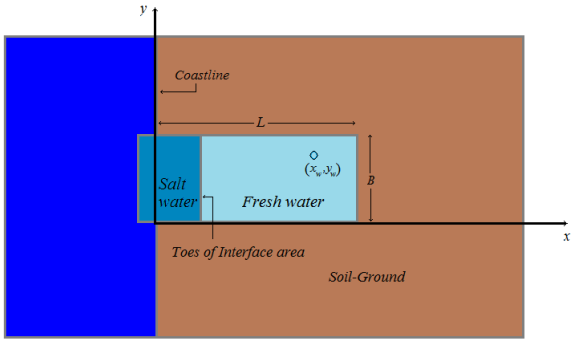
$$\text{Zone 1:} \quad z=0, \quad h_f=\sqrt{2\phi+(1+\delta)d^2}, \quad \text{for} \quad \tfrac{(1+\delta)\delta}{2}d^2 \le \phi,$$

$$\text{Zone 2:} \quad z=d-\xi, \quad \xi=\sqrt{\tfrac{2\phi}{\delta(1+\delta)}} \quad \text{and} \quad h_f=\sqrt{\tfrac{2\delta\phi}{1+\delta}}+d, \quad \text{for} \quad 0\le\phi\le\tfrac{(1+\delta)\delta}{2}d^2, \tag{7}$$

Το μέτωπο της υφάλμυρης σφήνας μπορεί να υπολογισθεί, επιλύοντας ως προς x_τ την μη-γραμμική εξίσωση (5) που παρουσιάσαμε παραπάνω.

2.1.3 Αναλυτική λύση

Ως αρχική προσέγγιση, εξετάζουμε στην παρούσα εργασία ομοιογενείς υδροφορείς (ως προς την παράμετρο της υδραυλικής αγωγιμότητας), ορθογώνιας γεωμετρίας, πεπερασμένου μεγέθους, με ένα άκρο στη θάλασσα και τρία άλλα αδιαπέραστα σύνορα (βλέπε Σχήμα 2). Η αναλυτική λύση του δυναμικού ροής



Σχήμα 2: Ομοιογενής υδροφορέας ορθογώνιας γεωμετρίας.

που παρουσιάζεται στις εργασίες των Strack [21] και Μαντόγλου [15], χρησιμοποιείται στο σημείο αυτό ως βασική εξίσωση εργασίας:

$$\begin{aligned}\phi(x,y) \;=\; & \tfrac{q}{K}x+\tfrac{N}{K}x(L-\tfrac{x}{2})+\textstyle\sum_{k=1}^{2}\sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{M}\tfrac{Q_j}{4\pi K}ln\left(\tfrac{a_{i,j}(x)+b_{k,j}(y)}{a_{i+1,j}(x)+b_{k,j}(y)}\right)+ \\ & +\textstyle\sum_{n=1}^{2}\sum_{k=3}^{6}\sum_{i=1}^{5}\sum_{j=1}^{M}\tfrac{Q_j}{4\pi K}ln\left(\tfrac{a_{i,j}(x)+b_{k,n,j}(y)}{a_{i+1,j}(x)+b_{k,n,j}(y)}\right)\end{aligned} \tag{8}$$

όπου

$$\begin{array}{ll} a_{1,j}(x) := (x - x_j)^2 & b_{1,j}(y) := (y - y_j)^2 \\ a_{2,j}(x) := (x + x_j)^2 & b_{2,j}(y) := (y + y_j)^2 \\ a_{3,j}(x) := (x - (2L - x_j))^2 & b_{3,n,j}(y) := (y - (2nB - y_j))^2 \\ a_{4,j}(x) := (x - (2L + x_j))^2 & b_{4,n,j}(y) := (y - (2nB + y_j))^2 \\ a_{5,j}(x) := (x + (2L + x_j))^2 & b_{5,n,j}(y) := (y + (2nB - y_j))^2 \\ a_{6,j}(x) := (x + (2L - x_j))^2 & b_{6,n,j}(y) := (y + (2nB + y_j))^2 \end{array} \quad (9)$$

Τα Q_j δηλώνουν ρυθμούς άντλησης (m^3/day) της j^{th} ενεργούς γεώτρησης w_j, $j = 1, \ldots, M$, με συντεταγμένες (x_j, y_j) .

2.1.4 Διαδικασία στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης της διαδικασίας αντλήσεων λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{array}{ll} \text{max:} & P \equiv P(\boldsymbol{Q}) = e^{-\left[S(\overline{\boldsymbol{Q}}) - S(\boldsymbol{Q})\right]^2 / S^2(\overline{\boldsymbol{Q}})} \in [0,1] \\ \text{s.t.:} & 0 \le \underline{Q_i} \le Q_i \le \overline{Q_i} < Q_A \\ & S(\boldsymbol{Q}) = \sum_{i=1}^{M} Q_i \le Q_A \\ & x_{\tau,i} \le x_i - d_s, \ i = 1, \ldots, M \end{array} \quad (10)$$

όπου P δηλώνει την αντικειμενική συνάρτηση, $\underline{Q_i}$ και $\overline{Q_i}$ είναι οι ελάχιστες και μέγιστες δυνατότητες αντλήσεως, αντίστοιχα, της i^{th} γεωτρήσεως, Q_A είναι η συνολική δυνατότητα αντλήσεως από ολόκληρο τον υδροφορέα, $x_{\tau,i}$ είναι η x-συντεταγμένη του υφάλμυρου μετώπου απέναντι από την i^{th} γεώτρηση και d_s μια προκαθορισμένη απόσταση ασφάλειας.

Ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης που χρησιμοποιούμε, όπως αναφέραμε και προηγουμένως, είναι η έκδοση ALOPEX V, με εξίσωση:

$$\boldsymbol{Q}^{(k)} = \boldsymbol{Q}^{(k-1)} + c_k \Delta P^{(k-1)} \Delta \boldsymbol{Q}^{(k-1)} + \boldsymbol{g}^{(k)} \ , \quad k = 2, 3, \ldots \quad (11)$$

όπου

$$\begin{array}{l} \Delta \mathbf{Q}^{(k)} = \boldsymbol{Q}^{(k)} - \boldsymbol{Q}^{(k-1)} \\ \Delta P^{(k)} = P(\boldsymbol{Q}^{(k)}) - P(\boldsymbol{Q}^{(k-1)}) \end{array} \quad (12)$$

για δεδομένες αρχικές τιμές των μεταβλητών ελέγχου $\boldsymbol{Q}^{(k)}$, με $k = 0, 1$. Η πραγματική παράμετρος c_k ελέγχου το πλάτος του όρου feedback, ενώ η $\boldsymbol{g}^{(k)}$ ελέγχει το πλάτος του όρου noise. Ισχύει δε ότι:

$$c_k = \frac{1}{|\Delta P^{(k-1)}|} \quad (13)$$

and

$$g_j^{(k)} = \gamma Q_j^{(k-1)} \mathcal{X}_j^{(k)} \ , \quad j = 1, \cdots, M \quad (14)$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όπου το γ αναφέρεται σε ένα μικρό ποσοστό $1\% - 2\%$ των $Q_j^{(k-1)}$, ενώ η $\mathcal{X}_j^{(k)}$ είναι μια τυχαία μεταβλητή με τιμές ομοιόμορφα κατανεμημένες στο διάστημα $(-0.5\ ,\ 1)$.

2.1.5 ALOPEX βελτιστοποίηση με χρήση περιορισμών

Σε κάθε επαναληπτικό βήμα του ALOPEX, μία κατάλληλα επιλεγμένη στρατηγική εφαρμογής κυρώσεων λαμβάνει χώρα, έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η καθοδήγηση της όλης διαδικασίας προς την κατεύθυνση όπου μεγιστοποιείται η χρησιμοποιούμενη αντικειμενική συνάρτηση, λαμβάνοντας υπόψη τους σχετικούς φυσικούς περιορισμούς του προβλήματος. Πιο συγκεκριμένα, βλέπουμε τα παρακάτω:

Σε κάθε επανάληψη του ALOPEX μεταβάλλονται οι τιμές όλων των μεταβλητών ελέγχου $Q_i,\ i = 1, \ldots, M$, χρησιμοποιώντας ένα σύστημα κυρώσεων ελέγχου 2 φάσεων, με τα εξής χαρακτηριστικά:

- Και στις δύο φάσεις εφαρμογής των κυρώσεων ελέγχου, οι τιμές εκείνων των Q_i οι οποίες χρειάζονται μεταβολή, μεταβάλλονται κατά ένα ποσοστό, όπου για τη συγκεκριμένη περίπτωση ισούται με 5%. Αυτή είναι μια 5% πολιτική, εφαρμοζόμενη μέσω της παραμέτρου $\delta = 0.05$.

- Στην πρώτη φάση, αρχικά, εάν η παρούσα άντληση $Q_i^{(k)}$ της i^{th} γεώτρησης, προτεινόμενη από τον ALOPEX, παραβιάζει τη μέγιστη ή την ελάχιστη δυνατή τιμή, δηλαδή $Q_i^{(k)} > \overline{Q}_i$ or $Q_i^{(k)} < \underline{Q}_i$, η τιμή της $Q_i^{(k)}$ τροποποιείται ως εξής:

$$Q_i^{(k)} = (1-\delta)\overline{Q}_i \text{ or } Q_i^{(k)} = (1+\delta)\underline{Q}_i \tag{15}$$

  για $i = 1, \ldots, M$.
  Παραμένοντας στην πρώτη φάση, ορίζουμε τα αθροίσματα

$$\begin{array}{l} S_{i-1}^{(k)} := \sum_{j=1}^{i-1} Q_j^{(k)} + \sum_{j=i}^{M} Q_j^{(k-1)} \\ \tilde{S} := S_{i-1}^{(k)} + \Delta Q_i^{(k)} - \overline{Q}_A \end{array} \tag{16}$$

  με $S_0^{(k)} = S(Q_1^{(k-1)}, \cdots, Q_M^{(k-1)})$, ενώ ο έλεγχος του συνολικού μεγίστου ακολουθεί. Έτσι, στην περίπτωση αυτή, εάν $\tilde{S} > 0$, η τιμή της $Q_i^{(k)}$ τροποποιείται ως εξής:

$$Q_i^{(k)} = Q_i^{(k)} - (1+\delta)\tilde{S} \tag{17}$$

  για $i = 1, \ldots, M$.

- Στη δεύτερη φάση, η εφαρμογή του περιορισμού προσέγγισης επιτυγχάνεται σε δύο κύκλους. Στον πρώτο, μόνο οι τιμές άντλησης των ενεργών

γεωτρήσεων σε κίνδυνο, δηλαδή $x_{\tau,i} > x_i - d_s$, τροποποιούνται, σύμφωνα με την εξίσωση:

$$Q_i^{(k)} = (1-\delta)Q_i^{(k)}, \tag{18}$$

για $i = 1, \ldots, M$.
Στον δεύτερο κύκλο, εάν οι τοπικές διορθώσεις αντλήσεων δεν κατάφεραν να περιορίσουν την επέλαση του υφάλμυρου μετώπου, εφαρμόζεται μία γενικευμένη τροποποίηση (βλέπε εξίσωση (18)) στις τιμές των αντλήσεων όλων των γεωτρήσεων.

2.1.6 Κριτήρια Τερματισμού

Με στόχο τη δημιουργία ενός αποτελεσματικού κριτηρίου ολοκλήρωσης της διαδικασίας βελτιστοποίησης, χρησιμοποιούμε έναν συνδυασμό της τυπικής απόκλισης $\sigma_{\hat{k}}$ της αντικειμενικής συνάρτησης στις τελευταίες $\sigma_{\hat{k}}$ επαναλήψεις (στην παρούσα εργασία ορίζεται ότι $\hat{k} = 20$) και της διαφοράς των μέσων τιμών $\mu_{\hat{k}}$ της αντικειμενικής συνάρτησης στο διάστημα των τελευταίων $2\hat{k}$ επαναλήψεων. Ορίζουμε τη χρησιμοποιούμενες μέση τιμή $\mu_{\hat{k}}$ και τυπική απόκλιση $\sigma_{\hat{k}}$ ως εξής:

$$\begin{aligned} \mu_{\hat{k}} &= \tfrac{1}{\hat{k}} \textstyle\sum_{i=k-\hat{k}}^{k} P(\boldsymbol{Q}^{(i)}) \\ \sigma_{\hat{k}} &= \sqrt{\tfrac{1}{\hat{k}} \textstyle\sum_{i=k-\hat{k}}^{k} (P(\boldsymbol{Q}^{(i)}) - \mu_{\hat{k}})^2} \end{aligned} \tag{19}$$

όπου k είναι η τρέχουσα επανάληψη, με $k - 2\hat{k} > 0$. Τότε, η πραγματοποίηση του παρακάτω κριτηρίου:

$$(\sigma_{\hat{k}} < \epsilon_1) \wedge (\mid \mu_{\hat{k}} - \mu_{2\hat{k}} \mid < \epsilon_2) \tag{20}$$

για θετικές μικρές ανοχές ϵ_1 και ϵ_2 (στην παρούσα εργασία και οι δύο ορίζονται να είναι ίσες με 10^{-2}), θεωρώντας επίσης ότι όλοι οι περιορισμοί ικανοποιούνται, τερματίζει τη διαδικασία βελτιστοποίησης.

2.1.7 Αριθμητικές προσομοιώσεις - Αποτελέσματα

Για την πιστοποίηση της στοχαστικής διαδικασίας βέλτιστης διαχείρισης αντλήσεων, που περιγράφεται στις προηγούμενες παραγράφους, πραγματοποιήθηκε ένα μεγάλος αριθμός προσομοιώσεων που υλοποίησαν ένα μεγάλο φάσμα διαφορετικών τιμών παραμέτρων και κλιματικών συνθηκών. Στην ενότητα αυτή παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα μίας ενδεικτικής προσομοίωσης για να περιγράψουμε τα τυπικά χαρακτηριστικά της στοχαστικής διαδικασίας βελτιστοποίησης.

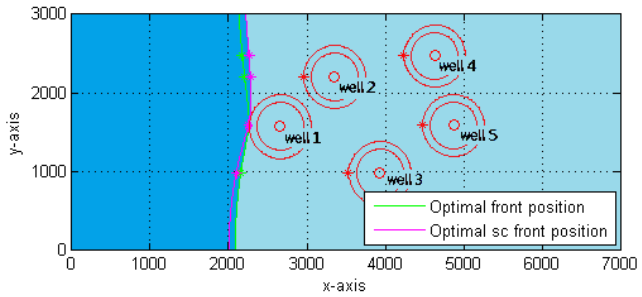
Ο υπό μελέτη υδροφορέας διαθέτει 5 ενεργές γεωτρήσεις τοποθετημένες στις συντεταγμένες $(x_1, y_1) = (2657, 1572)$, $(x_2, y_2) = (3353, 2200)$, $(x_3, y_3) = (3932, 975)$,

$(x_4, y_4) = (4632, 2470)$ και $(x_5, y_5) = (4873, 1586)$, τα δε χαρακτηριστικά του περιγράφονται στον Πίνακα 1 που ακολουθεί.

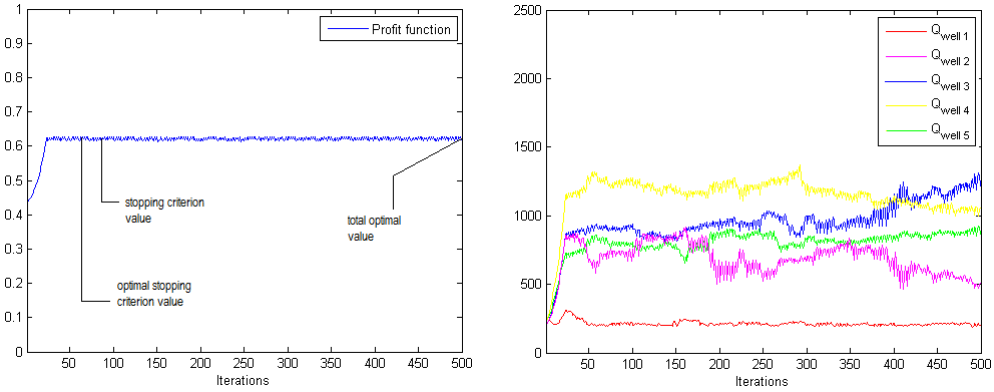
Πίνακας 1: Χαρακτηριστικά υδροφορέα Καλύμνου.

Aquifer characteristics	*Well characteristics*
$L = 7000m$	$r_c = 300m$
$W = 3000m$	$d_s = 100m$
$K = 100m/day$	$\overline{Q}_A = 15000m^3/day$
$q = 1.23m^2/day$	$\overline{Q}_j = 2500m^3/day, \quad j = 1, \ldots, M$
$d = 25m$	$\underline{Q}_j = 200m^3/day, \quad j = 1, \ldots, M$
$N = 30mm/year$	M: *number of aquifer wells.*

Τα αποτελέσματα ενός τυπικού ελέγχου 500 επαναλήψεων του ALOPEX, καθώς και τα αντίστοιχα αριθμητικά δεδομένα που τις τεκμηριώνουν, συνοψίζονται στα Σχήματα 3-4 και στον πίνακα 2.



Σχήμα 3: Βέλτιστη θέση του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας.



(α΄) Objective function $P(\boldsymbol{Q})$ vs iterations. (β΄) Well pumping rates Q_j vs iterations.

Σχήμα 4: Αντικειμενική συνάρτηση και αντλήσεις των ενεργών γεωτρήσεων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Μελετώντας το Σχήμα 4α΄, παρατηρούμε ότι ο ALOPEX οδηγεί την αντικειμενική συνάρτηση $P(\boldsymbol{Q})$ λαμβάνοντας υπόψη τους σχετικούς περιορισμούς, κοντά στη μέγιστη τιμή της έπειτα από λίγες σχετικά επαναλήψεις. Επιπλέον, παρατηρώντας τις στήλες 3 και 5 του πίνακα 2, είναι σαφές ότι η βέλτιστη συνολική ικανότητα άντλησης $S(\boldsymbol{Q})$ διαφέρει από τη βέλτιστη τιμή των $S(\boldsymbol{Q})$ μετά την εφαρμογή του κριτηρίου τερματισμού μόνο σε λίγα κυβικά μέτρα.

Πίνακας 2: Αριθμητικά αποτελέσματα στοχαστικού αλγορίθμου ALOPEX

ALOPEX Performance	*Terminal Values*	*Total Optimal Values*	*Stopping Criterion (SC) Values*	*SC Optimal Values*
k *(# iter.)*	500	500	84	63
$P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	0.62769	0.62769	0.62467	0.62753
$Q_1^{(k)}$	202.27	202.27	214.30	206.41
$Q_2^{(k)}$	504.38	504.38	739.03	720.10
$Q_3^{(k)}$	1303.05	1303.05	911.41	923.57
$Q_4^{(k)}$	1047.07	1047.07	1254.90	1278.27
$Q_5^{(k)}$	912.85	912.85	805.97	838.96
$S(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	3969.62	3969.62	3925.60	3967.30
Time in secs	7.87		1.32	

2.2 Συνδυασμός ALOPEX με πλατφόρμα PTC για δεδομένα πεδίου.

2.2.1 PTC - Princeton Transport Code

Η πλατφόρμα PTC (Princeton Transport Code, βλέπε [6]) είναι ένας τρισδιάστατος προσομοιωτής υπόγειας ροής και μεταφοράς μάζας-ρύπων, που χρησιμοποιεί έναν συνδυασμό των μεθόδων πεπερασμένων στοιχείων και πεπερασμένων διαφορών, όπου για την περίπτωση ενός ομοιογενούς μη-περιορισμένου υδροφορέα λαμβάνει τη μορφή (βλέπε [10]):

$$\nabla \cdot (Kh\nabla h) + W = S_y \frac{\partial h}{\partial t} \tag{21}$$

όπου h δηλώνει την υδραυλική κεφαλή, K είναι η υδραυλική αγωγιμότητα, W η ογκομετρική ροή ανά μονάδα όγκου, S_y είναι η ειδική απόδοση και t είναι ο χρόνος.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Το PTC χρησιμοποιεί έναν υβριδικό αλγόριθμο διάσπασης για την επίλυση του πλήρως τρισδιάστατου συστήματος. Κάθε τομέας διακριτοποιείται σε παράλληλες οριζόντιες στρώσεις, σε κάθε μία από τις οποίες η χρήση πεπερασμένων στοιχείων επιτρέπει την ακριβή αναπαράσταση γεωμετρικά ακανόνιστων περιοχών. Για την κατακόρυφη σύνδεση των στρωμάτων χρησιμοποιείται η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών. Αυτή η υβριδική σύζευξη πεπερασμένων στοιχείων και πεπερασμένων διαφορών, παρέχει την ευκαιρία να χωριστούν οι υπολογισμοί σε δύο στάδια κατά τη διάρκεια ενός δεδομένου χρόνου επανάληψης. Στο πρώτο βήμα, όλες οι οριζόντιες εξισώσεις επιλύονται, ενώ στο δεύτερο βήμα, επιλύονται οι κάθετες εξισώσεις που συνδέουν τις στρώσεις (βλέπε [6]). Αυτό το μοντέλο έχει χρησιμοποιηθεί με επιτυχία σε αρκετές προηγούμενες μελέτες (π.χ. [5], [14], [8]).

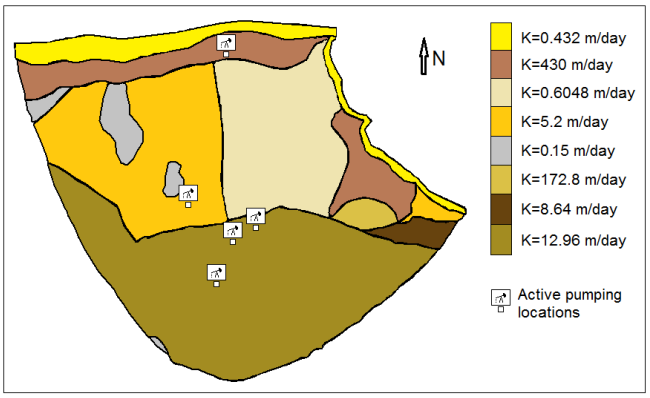
Στα πλαίσια της παρούσας ερευνητικής δραστηριότητας, το μοντέλο PTC χρησιμοποιείται σε συνδυασμό με τις προσεγγίσεις sharp interface και Ghyben-Herzberg (που περιγράφησαν αναλυτικά στο κεφάλαιο 2.1), προκειμένου να εκτιμηθεί ο βαθμός διείσδυσης υφάλμυρου νερού στο εσωτερικό του υδροφορέα.

2.2.2 Περιοχή μελέτης και αριθμητική μοντελοποίηση

Η περιοχή μελέτης βρίσκεται στο δήμο Χερσονήσου, ένας υδροφορέας στη βόρεια ακτή του Ελληνικού νησιού της Κρήτης, $25\ km$ ανατολικά της πόλης του Ηρακλείου. Η λεκάνη της Χερσονήσου καλύπτει μια έκταση περίπου $18\ km^2$, και εκτείνεται για $3.8\ km$ σε W - E κατεύθυνση και σχεδόν $4.7\ km$ σε κατεύθυνση N - S. Κατά τη διάρκεια της θερινής περιόδου η ζήτηση του νερού είναι υψηλή λόγω της εκτεταμένων τουριστικών και γεωργικών δραστηριοτήτων, εντείνοντας το πρόβλημα της υφαλμύρισης. Η περιοχή ενδιαφέροντος περιλαμβάνει πέντε ενεργές γεωτρήσεις που δραστηριοποιούνται όλο το χρόνο, ιδιαίτερα κατά τη διάρκεια της καλοκαιρινής περιόδου, προκειμένου να καλυφθούν οι ανάγκες άρδευσης και ύδρευσης, εξαιτίας της αύξησης του πληθυσμού της κατά τη διάρκεια της θερινής περιόδου λόγω του αυξημένου τουρισμού.

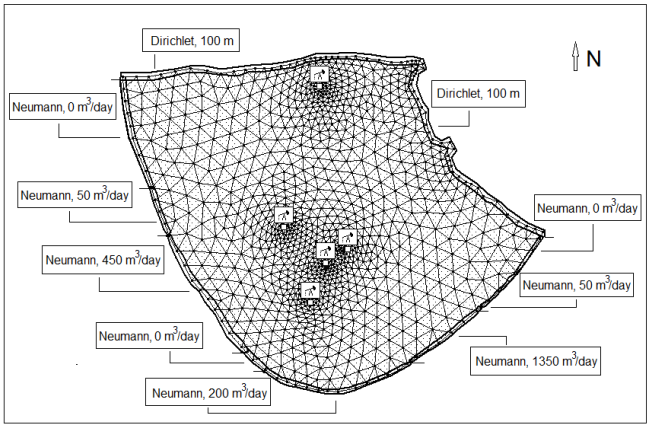
Η υδρολογική λεκάνη αποτελείται κυρίως από καρστικοποιημένους ασβεστόλιθους μεταβλητής υδραυλικής αγωγιμότητας και μάργες, ενώ κατά μήκος της ακτογραμμής μπορούν να βρεθούν αλλουβιανές αποθέσεις υψηλής διαπερατότητας (βλέπε [19]). Οι τιμές της υδραυλικής αγωγιμότητας που εμφανίζονται στους συγκεκριμένους γεωλογικούς σχηματισμούς παρουσιάζονται αναλυτικά στο Σχήμα 5.

Αρχικά, προσομοιώνουμε τη ροή των υπόγειων υδάτων για το χρονικό διάστημα των 6 μηνών, που αντιπροσωπεύει την εποχή της ξηρασίας, όταν η διείσδυση αλμυρού νερού είναι πιο έντονη. Εν συνεχεία, προσομοιώνουμε τη ροή των υδάτων για ένα νέο εξάμηνο, το οποίο όμως αντιστοιχεί σε χειμερινές συν-



Σχήμα 5: Περιοχές με διαφορετικές τιμές υδραυλικής αγωγιμότητας.

θήκες ανατροφοδότησης του υδροφορέα, με αυξημένη εισροή γλυκού νερού στη λεκάνη. Μια Dirichlet οριακή συνθήκη σταθερής κεφαλής ίση με $100\ m$ εφαρμόστηκε κατά μήκος της ακτής για να προσομοιώσει το όριο στη θάλασσα, ενώ διάφορες συνθήκες Neumann εφαρμόζονται στο νότιο όριο της περιοχής κατά τη διάρκεια της διαδικασίας βαθμονόμησης, προκειμένου να προσομοιαστεί η πλαϊνή εισροή υπόγειων υδάτων με τις μετρούμενες τιμές υδραυλικής κεφαλής στις γεωτρήσεις (βλέπε Σχήμα 6). Σχετικά με θέση του μετώπου της υφάλμυρης



Σχήμα 6: Περιφερειακή ανατροφοδότηση του υδροφορέα και πλέγμα διακριτοποίησης αποτελούμενο από 1984 στοιχεία και 1050 κόμβους, τους οποίους ο κώδικας PTC χρησιμοποιεί για να υπολογίζει τις τιμές της υδραυλικής κεφαλής στο εσωτερικό του υδροφορέα.

σφήνας, σύμφωνα με σχέση των Ghyben-Herzberg, η τιμή της υδραυλικής κεφαλής εκτιμάται στα $h_f = 2.5\,m$, δεδομένου ότι το βάθος του υπό μελέτη υδροφορέα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ισούται με $100m$. Επομένως, οι ισοϋψείς των $100+2.5 = 102.5\,m$ αντιπροσωπεύουν το όριο της υδραυλικής κεφαλής πέραν από το οποίο, η περιοχή θεωρείται ότι έχει υποστεί το φαινόμενο της υφαλμύρισης.

2.2.3 Διαδικασία βελτιστοποίησης διαχείρισης αντλήσεων

Ως M ορίζουμε να είναι το πλήθος των ενεργών γεωτρήσεων στην τοπική περιοχή, ενώ το διάνυσμα $\boldsymbol{Q}$ ορίζεται ως εξής:

$$\boldsymbol{Q} = (Q_1, \ldots, Q_M) \tag{22}$$

όπου Q_i, δηλώνει τον ρυθμό άντλησης της i^{th} ενεργούς γεωτρήσεως με συντεταγμένες (x_i, y_i), για $i = 1, \ldots, M$. Ο αντικειμενικός μας στόχος, δηλαδή η μεγιστοποίηση των αντλήσεων γλυκού νερού, αποφεύγοντας παράλληλα τη μετακίνηση και είσοδο του υφάλμυρου μετώπου στο εσωτερικό μια περιοχής ασφάλειας γύρω από κάθε γεώτρηση, μπορεί να παρουσιαστεί μέσω του παρακάτω μη-γραμμικού προβλήματος βελτιστοποίησης (βλέπε [25]):

$$\begin{aligned} \text{max:} \quad & P \equiv P(\boldsymbol{Q}) = e^{-\left[S(\overline{\boldsymbol{Q}}) - S(\boldsymbol{Q})\right]^2 / S^2(\overline{\boldsymbol{Q}})} \in [0,1] \\ \text{s.t.:} \quad & 0 \le \underline{Q_i} \le Q_i \le \overline{Q_i} < Q_A \\ & S(\boldsymbol{Q}) = \textstyle\sum_{i=1}^{M} Q_i \le Q_A \\ & x_{\tau,i} \le x_i - d_s,\ i = 1, \ldots, M \end{aligned} \tag{23}$$

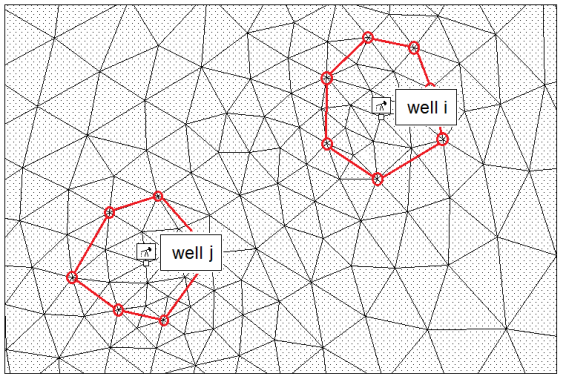
όπου P δηλώνει την αντικειμενική συνάρτηση, $\underline{Q_i}$ και $\overline{Q_i}$ είναι οι ελάχιστες και μέγιστες δυνατότητες αντλήσεως, αντίστοιχα, της i^{th} γεωτρήσεως, Q_A είναι η συνολική δυνατότητα αντλήσεως από ολόκληρο τον υδροφορέα, $x_{\tau,i}$ είναι η x-συντεταγμένη του υφάλμυρου μετώπου απέναντι από την i^{th} γεώτρηση και d_s μια προκαθορισμένη απόσταση ασφάλειας.

2.2.4 Στρατηγικές ασφάλειας

Ο ρόλος της παραμέτρου d_s, που χρησιμοποιείται στις εξισώσεις (23), είναι κεντρικός στη δημιουργία μιας στρατηγικής ασφάλειας για την προστασία του υδροφορέα. Στην εργασία αυτή, η παράμετρος d_s θεωρείται ότι αντιπροσωπεύει την μέση ακτίνα του πολυγωνικού τομέα προστασίας γύρω από κάθε ενεργή γεώτρηση. Αυτή η περιοχή αποτελείται από έναν αριθμό κόμβων προστασίας, γύρω από τα ενεργά σημεία άντλησης (βλέπε Σχήμα 7). Στην παρούσα εφαρμογή μας, ο αποφασιστικός παράγοντας για τον καθορισμό της τιμής της d_s είναι η απαίτησή μας, να παραμένει το μέτωπο της υφάλμυρης σφήνας εκτός της περιοχής ασφάλειας γύρω από κάθε γεώτρηση, χρησιμοποιώντας τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων που προτείνει ο ALOPEX αλλά και τιμές αντλήσεων τεχνητά

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

προσαυξημένες κατά 10%. Η απαίτηση αυτή μας οδήγησε άμεσα στον καθορισμό της τιμής αυτής της παραμέτρου μέσω ενός πλήθους προσομοιώσεων, ως $d_s = 180\ m$. Να επισημάνουμε ότι η συγκεκριμένη τιμή, αν και στην παρούσα εφαρμογή μας διατηρείται ομοιόμορφη για όλες τις ενεργές γεωτρήσεις, μπορεί να οριστεί διαφορετικά για κάθε μία από αυτές, ανάλογα με την τοπική στρατηγική προστασίας που ακολουθούμε.



Σχήμα 7: Κόμβοι προστασίας (σε κόκκινους κύκλους) γύρω από κάθε ενεργή γεώτρηση, τοποθετημένοι σε μια μέση απόσταση των $d_s = 180\ m$. Ορίζεται έτσι μια πολυγωνική περιοχή ασφάλειας, όπου μέσω της εφαρμογής των κυρώσεων ελέγχου του ALOPEX, επιτυγχάνεται ο έλεγχος κίνησης του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας στο εσωτερικό του υδροφορέα.

2.2.5 ALOPEX βελτιστοποίηση με χρήση περιορισμών

Ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης που χρησιμοποιούμε, όπως και στην προηγούμενη ενότητα, είναι η έκδοση ALOPEX V, με εξίσωση:

$$\boldsymbol{Q}^{(k)} = \boldsymbol{Q}^{(k-1)} + c_k \Delta P^{(k-1)} \Delta \boldsymbol{Q}^{(k-1)} + \boldsymbol{g}^{(k)}\ , \quad k = 2, 3, \ldots \tag{24}$$

όπου

$$\begin{aligned} \Delta \boldsymbol{Q}^{(k)} &= \boldsymbol{Q}^{(k)} - \boldsymbol{Q}^{(k-1)} \\ \Delta P^{(k)} &= P(\boldsymbol{Q}^{(k)}) - P(\boldsymbol{Q}^{(k-1)}) \end{aligned} \tag{25}$$

για δεδομένες αρχικές τιμές των μεταβλητών ελέγχου $\boldsymbol{Q}^{(k)}$, με $k = 0, 1$. Η πραγματική παράμετρος c_k ελέγχου το πλάτος του όρου feedback, ενώ η $\boldsymbol{g}^{(k)}$ ελέγχει το πλάτος του όρου noise. Ισχύει δε ότι:

$$c_k = \frac{1}{|\Delta P^{(k-1)}|} \tag{26}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

and

$$g_j^{(k)} = \gamma Q_j^{(k-1)} \mathcal{X}_j^{(k)} \ , \quad j = 1, \cdots, M \tag{27}$$

όπου το γ αναφέρεται σε ένα μικρό ποσοστό $1\% - 2\%$ των $Q_j^{(k-1)}$, ενώ η $\mathcal{X}_j^{(k)}$ είναι μια τυχαία μεταβλητή με τιμές ομοιόμορφα κατανεμημένες στο διάστημα $(-0.5 \ , \ 1)$.

Σε κάθε επανάληψη του ALOPEX μεταβάλλονται οι τιμές όλων των μεταβλητών ελέγχου $Q_i, \ i = 1, \ldots, M$, χρησιμοποιώντας ένα σύστημα κυρώσεων ελέγχου 2 φάσεων. Η πρώτη φάση επικεντρώνεται στην εφαρμογή δύο περιορισμών που περιγράφονται στις εξισώσεις (23), οι οποίοι προηγούνται της εφαρμογής του κώδικα PTC, ενώ στην δεύτερη φάση γίνεται η εφαρμογή του τρίτου περιορισμού, ο οποίος ακολουθεί την εφαρμογή του PTC. Για την αναλυτική περιγραφή του χρησιμοποιούμενου συστήματος κυρώσεων ελέγχου, παραπέμπουμε στο προηγούμενο κεφάλαιο 2.1.4.

Στο Σχήμα 8 που ακολουθεί, η μεθοδολογία βελτιστοποίησης αντλήσεων ALOPEX/PTC όπως αυτή περιγράφηκε ως τώρα, παρουσιάζεται μέσω του παρακάτω διαγράμματος ροής.

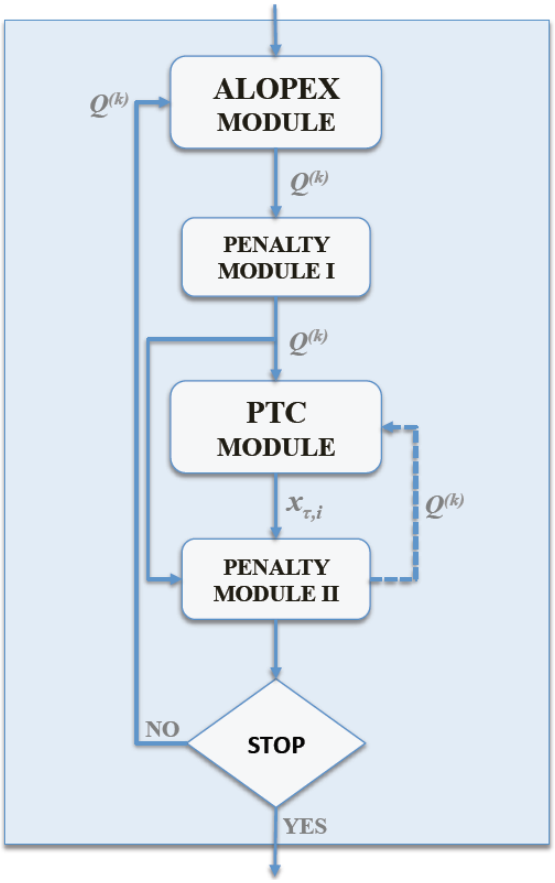
2.2.6 Αριθμητικές προσομειώσεις

Οι προσομοιώσεις που ακολουθούν παρουσιάζουν τη συμπεριφορά του συνδυαστικού αλγορίθμου ALOPEX/PTC σε ένα καλοκαιρινό σενάριο άντλησης-ανατροφοδότησης, όπου $N = 0 \ mm/year$, ενώ η πλαϊνή ανατροφοδότηση του υδροφορέα χαρακτηρίζεται από Neumann συνοριακές συνθήκες, όπως παρουσιάζεται στο Σχήμα 6.

Στον υδροφορέα αυτό εμφανίζονται 5 ενεργές γεωτρήσεις, οι συντεταγμένες των οποίων (βλέπε Σχήμα 6) έχουν ορισθεί βάσει ενός γεωγραφικού συστήματος συντεταγμένων. Από τις 5 αυτές γεωτρήσεις, η γεώτρηση No 1 βρίσκεται τοποθετημένη πολύ κοντά στη θαλάσσια ακτογραμμή, με συνέπεια να είναι διαρκώς υφαλμυρισμένη, ανεξάρτητα με το αν είναι ή όχι ενεργή. Το νερό που εξάγεται από τη γεώτρηση αυτή είναι πάντοτε ακατάλληλο για ύδρευση ή άρδευση της τοπικής κοινότητας. Εντός του αλγορίθμου ALOPEX/PTC, μελετάμε τις τιμές αντλήσεων που η γεώτρηση αυτή μπορεί να αποδώσει, αλλά λαμβάνοντας υπόψη την ιδιαίτερα κακή τοποθέτησή της κοντά στη θάλασσα, δεν τη χρησιμοποιούμε στο συνολικό πλάνο βέλτιστων αντλήσεων που κατασκευάζουμε για τον υδροφορέα αυτό.

Στον Πίνακα 3 παρουσιάζουμε τις μέγιστες $\overline{Q}_i$ και ελάχιστες δυνατότητες αντλήσεων για όλες τις ενεργές γεωτρήσεις του υδροφορέα υπό μελέτη, με την ιδιότητα οι ελάχιστες να ικανοποιούν τη σχέση: $\underline{Q}_i = 0.3 * \overline{Q}_i$ για $i \in \{1, .., 5\}$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 8: Διάγραμμα ροής της διαδικασίας βελτιστοποίησης ALOPEX/PTC.

Πίνακας 3: Δυνατότητες άντλησης (m^3/day) των θέσεων ενεργών γεωτρήσεων

i	1	2	3	4	5
$\overline{Q}_i$	1800.00	2520.00	576.00	2520.00	146.00
$\underline{Q}_i$	540.00	756.00	172.80	756.00	43.80

Προφίλ DRY_5: Καλοκαιρινό σενάριο 5 ενεργών γεωτρήσεων Το προφίλ Dry_5 αντιστοιχεί σε ένα ξηρό, καλοκαιρινό σενάριο ($N = 0\ mm/year$) σενάριο, όπου η γεώτρηση No 1 είναι ενεργή αλλά αντλεί μονάχα υφάλμυρο νερό.

Όλα τα αποτελέσματα από την ALOPEX/PTC διαδικασία στοχαστικής βελτιστοποίησης κατά τη διάρκεια ενός τυπικού κύκλου 500 επαναλήψεων, συνοψίζονται στον Πίνακα 4 (όπου t_k είναι το υπολογιστικό κόστος σε χρόνο του αλγορίθμου μέχρι την k^{th} επανάληψη, σε δευτερόλεπτα) καθώς και στο Σχήμα 9.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας 4: Αλγόριθμος ALOPEX/PTC: Προφίλ DRY_5

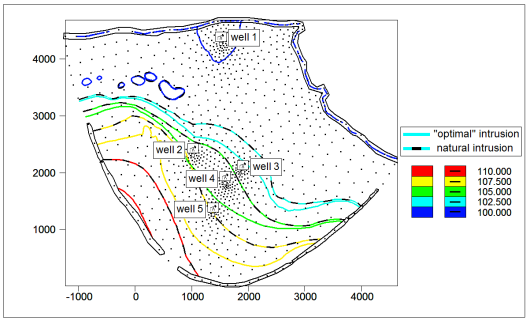
Problem Parameters	*Total Optimal Values*	*Stopping Criterion Optimal Values*
k *(# iter.)*	404	79
$P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	0.9756	0.97153
$Q_1^{(k)}$	1787.02	1735.11
$Q_2^{(k)}$	1368.66	1340.61
$Q_3^{(k)}$	560.20	561.66
$Q_4^{(k)}$	2519.43	2515.91
$Q_5^{(k)}$	138.09	123.45
$S(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	6373.40	6276.74
t_k	378.5125	74.0161

Παρατηρώντας το Σχήμα 9α΄ εύκολα διαπιστώνει κάποιος ότι οι θέσεις των γεωτρήσεων, εκτός φυσικά από τη θέση No 1, παραμένουν ασφαλείς από την διείσδυση υφάλμυρου νερού, δεδομένου ότι το υφάλμυρο μέτωπο (ισοϋψής γραμμή των $h = 102.5\ m$) κρατήθηκε σε απόσταση τουλάχιστον $d_s = 180\ m$ μακριά από όλες τις προστατευόμενες περιοχές που δραστηριοποιούνται. Είναι επίσης σημαντικό ότι, όπως το Σχήμα 9β΄ υποδηλώνει, ότι προσαυξήσεις 10% για όλους τους βέλτιστους ρυθμούς άντλησης Q_i που αναφέρονται στον Πίνακα 4, δεν αποτελούν απειλή για την ακεραιότητα των προστατευόμενων ενεργών περιοχών άντλησης, λόγω της κατάλληλα επιλεγμένης τιμής της απόστασης ασφαλείας d_s, όπως αυτή περιγράφηκε προηγουμένως στο κεφάλαιο 2.2.4. Παρατηρούμε ότι ο αλγόριθμος ALOPEX οδηγεί την αντικειμενική συνάρτηση (βλέπε Σχήμα 9γ΄) σε μία γειτονιά βέλτιστων, υπό περιορισμούς, λύσεων έπειτα από σχεδόν 80 επαναλήψεις και παραμένει κοντά σε αυτήν, για το υπόλοιπο της διαδικασίας, μέσα σε σχετικά μικρές διακυμάνσεις πλάτους. Παρόμοια συμπεριφορά μπορεί να παρατηρηθεί στο Σχήμα 9δ΄, για τις μεταβλητές ελέγχου Q_i της διαδικασίας.

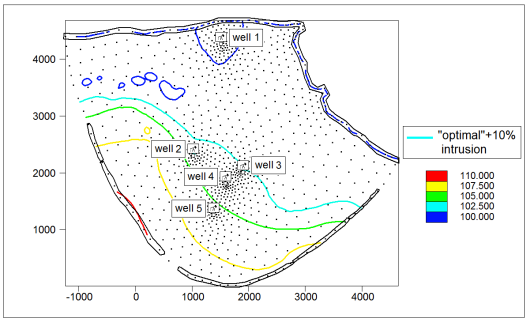
Ο συνολικός χρόνος λειτουργίας της διαδικασίας βελτιστοποίησης ισούται με $t_{500} = 468.4561\ secs$, με μέσο χρόνο ανά επανάληψη ίσο με $0.9369\ secs$. Επισημαίνουμε ότι το έντονο υπολογιστικά μέρος της διαδικασίας αυτής είναι η εκτέλεση της μονάδας PTC. Ως εκ τούτου, το συνολικό υπολογιστικό κόστος εξαρτάται κυρίως από τον αριθμό των εκτελέσεων PTC, η οποία συνδέεται στενά με το πλήθος των διορθώσεων που το σύστημα ελέγχου κυρώσεων αναγκάζεται να πραγματοποιήσει στις τρέχουσες προτεινόμενες τιμές αντλήσεων.

Να συμπληρώσουμε στο σημείο αυτό ότι στις εργασίες μας [23] και [24] γίνεται αναλυτική περιγραφή τριών ακόμη σεναρίων ανατροφοδότησης του συγκεκριμένου υδροφορέα.

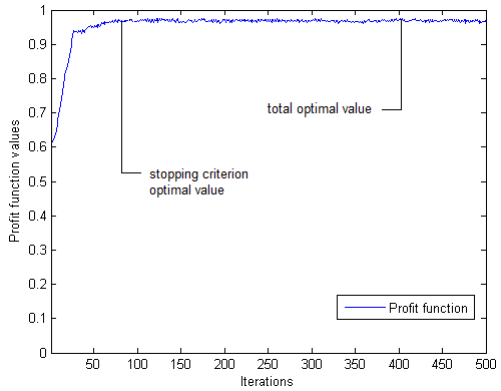
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



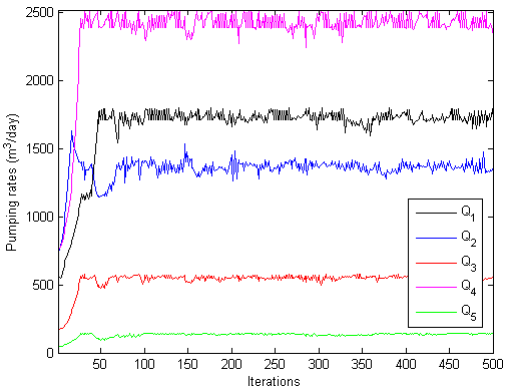
(α΄) Τιμές υδραυλικής κεφαλής χρησιμοποιώντας τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.



(β΄) Τιμές υδραυλικής κεφαλής χρησιμοποιώντας τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων προσαυξημένες κατά 10%.



(γ΄) Τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$ κατά τη διάρκεια των $k = 500$ επαναλήψεων.



(δ΄) Τιμές αντλήσεων Q_i κατά τη διάρκεια των $k = 500$ επαναλήψεων.

Σχήμα 9: Προφίλ DRY_5: Συμπεριφορά του αλγορίθμου ALOPEX/PTC για το Dry σενάριο με 5 ενεργές γεωτρήσεις, σε ένα τυπικό κύκλο 500 επαναλήψεων.

2.2.7 Αποτελέσματα ALOPEX/PTC διαχείρισης υδροφορέα Χερσονήσου

Ο συνδυαστικός στοχαστικός αλγόριθμος ALOPEX/PTC στην περίπτωση του υδροφορέα της Χερσονήσου υπήρξε ιδιαίτερα αποτελεσματικός, αφού αφενός μεγιστοποίησε τις αντλήσεις γλυκού νερού από τις υπάρχουσες γεωτρήσεις, αφετέρου οι γεωτρήσεις αυτές παρέμειναν ασφαλείς από το φαινόμενο της υφαλμύρισης. Η προστασία τους επιτυγχάνεται μέσω της χρήσεως κατάλληλων περιορισμών ενσωματωμένων στον αλγόριθμο ALOPEX, οι οποίοι επεμβαίνοντας στις προτεινόμενες από τον αλγόριθμο αντλήσεις, περιορίζουν τη μετακίνηση του υφάλμυρου μετώπου στο εσωτερικό του υδροφορέα, σε περιοχές εκτός των περιοχών ασφάλειας που ορίσαμε γύρω από κάθε γεώτρηση. Με τη διαδικα-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

σία αυτή κατέστη δυνατή η αξιοποίηση μεγαλύτερων ποσοτήτων γλυκού νερού από τις υπάρχουσες γεωτρήσεις, σε σχέση με δεδομένα αντλήσεων γνωστά στη βιβλιογραφία.

2.3 Συνδυασμός ALOPEX με πλατφόρμα FEniCS για δεδομένα πεδίου.

Σε αυτή την ερευνητική δραστηριότητα έγινε μελέτη της επίλυσης προβλημάτων υφαλμύρισης υδροφορέων με τη χρήση λογισμικών ανοικτού κώδικα FEniCS ([29], [30]). Η πλατφόρμα αυτή υλοποιεί αριθμητικές μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων υψηλής ακρίβειας για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Πιο συγκεκριμένα έγινε επίλυση των προβλημάτων που μοντελοποιούν την υφαλμύριση των υδροφορέων της περιοχών Καλύμνου και Χερσονήσου Κρήτης. Η γεωμετρία του πρώτου υδροφορέα επιτρέπει τη διακριτοποίηση μέσω ομοιόμορφα δομημένου πλέγματος, ενώ αυτή του δεύτερου τη χρήση μη δομημένων πλεγμάτων στη κατασκευή των πεπερασμένων στοιχείων της αριθμητικής μεθόδου.

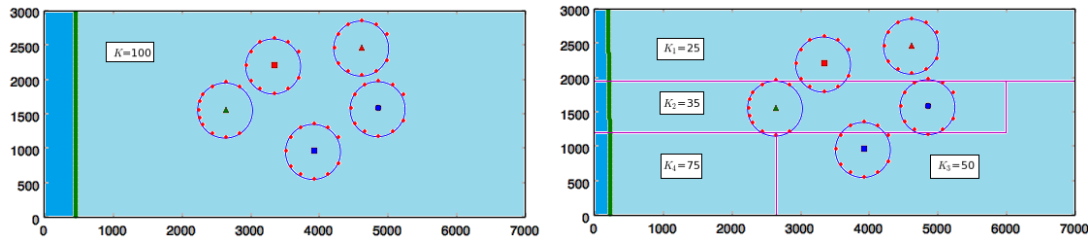
2.3.1 Υδροφορέας Καλύμνου

Όπως έχει αναφερθεί ο υδροφορέας της Καλύμνου μπορεί να προσομοιωθεί με μια ορθογώνια περιοχή 7 επί 3 χιλιομέτρων. Στη διαφορική εξίσωση, η επίλυση της οποίας θα προσδιορίσει το δυναμικό ροής, σε αυτή τη περίπτωση θα έχει συνοριακές συνθήκες Dirichlet μηδέν στην αριστερή πλευρά του χωρίου όπου υπάρχει η θάλασσα. Στις υπόλοιπες πλευρές οι συνοριακές συνθήκες είναι τύπου Neumann με τις δυο μεγάλες πλευρές του να έχουν τιμή ίση με μηδέν, ενώ η άλλη τιμή ίση με 1.23 λόγω του ορεινού όγκου που υπάρχει εκεί και την τροφοδότηση του υδροφορέα με γλυκό νερό από τα βουνά. Ως προς τη βροχόπτωση έγινε ομοιόμορφη κατανομή κατανομή ύψους 3 εκατοστών σε ετήσια βάση σε ολόκληρη τη περιοχή του υδροφορέα.

Η μελέτη του προβλήματος υφαλμύρισης περιλαμβάνει δυο είδη προσεγγίσεων. Το πρόβλημα που αντιστοιχεί στη πρώτη προσέγγιση του ζητήματος περιλαμβάνει την υπόθεση της ύπαρξης ομοιόμορφης υδραυλικής αγωγιμότητας $K = 100$ σε όλη την έκταση του υδροφορέα.

Η δεύτερη προσέγγιση του προβλήματος περιλαμβάνει τη χρήση τεσσάρων περιοχών με διαφορετικές τιμές υδραυλικής αγωγιμότητας εδάφους, η οποία ποικίλει μεταξύ των τιμών 25, 35, 50 και 75. Το Σχήμα 10 εμφανίζει τον υδροφορέα σύμφωνα με τις δυο διαφορετικές προσεγγίσεις καθώς και το μέτωπο της φυσικής υφαλμύρισης για τη περίπτωση μηδενικών αντλήσεων από τα πέντε πηγάδια της περιοχής του υδροφορέα. Οι γαλάζιοι κύκλοι περιμετρικά των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 10: Υδροφορέας προβλήματος Καλύμνου με διαφορετικές προσεγγίσεις ως προς τις υδραυλικές αγωγιμότητες του εδάφους.

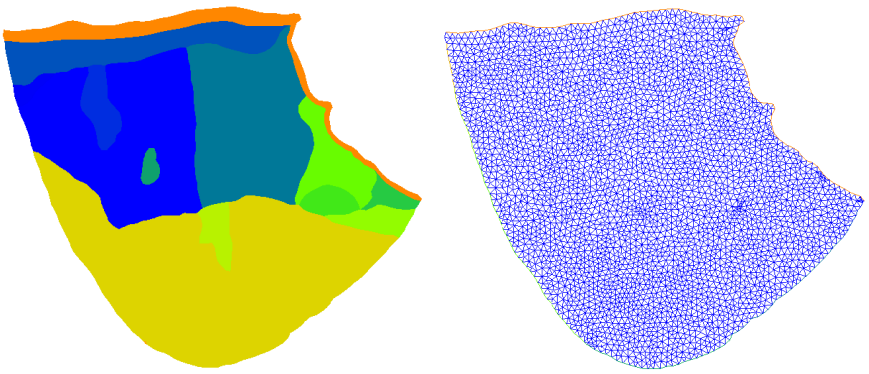
πηγαδιών καθορίζουν την απαγορευμένη ζώνη εισόδου του μετώπου της θάλασσας, ενώ τα κόκκινα σημεία στις περιφέρειες τους είναι τα σημεία ελέγχου (guard points). Η ζώνη αυτή έχει προσδιοριστεί στη κυκλική περιοχή κάθε πηγαδιού με κέντρο το σημείο του και ακτίνα ίση με 400 μέτρα.

Η διακριτοποίηση του υδροφορέα έγινε χρήση ορθογώνιων τριγώνων, αφού η γεωμετρία του υδροφορέα το επέτρεπε. Έτσι η αριθμητική μέθοδος επίλυσης βασίστηκε σε ομοιόμορφα τριγωνικά πεπερασμένα στοιχεία για όλο τον υδροφορέα.

Ως προς τη μέθοδο βελτιστοποίησης των αντλήσεων εφαρμόστηκε ο αλγόριθμος της μεθόδου ALOPEX με τα ίδια ακριβώς χαρακτηριστικά της υλοποίησης του προβλήματος στην πλατφόρμα λογισμικού PTC.

2.3.2 Υδροφορέας Χερσονήσου Κρήτης

Η γεωμετρία του συγκεκριμένου προβλήματος, όπως έχει ήδη περιγραφεί, εισήχθη επιτυχώς ψηφιακά στη πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Στο Σχήμα 11 εμφανίζονται οι περιοχές με διαφορετική υδραυλική αγωγιμότητα που απαρτίζουν το γεωλογικό χάρτη του υδροφορέα καθώς και η διακριτοποίηση τους.



Σχήμα 11: Διακριτοποίηση υδροφορέα προβλήματος δοκιμής Χερσονήσου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στη μελέτη επίλυσης του συγκεκριμένου προβλήματος στην πλατφόρμα λογισμικού FEniCS χρησιμοποιήθηκαν κατάλληλες τιμές στις συνοριακές συνθήκες, καθώς και κατάλληλη κανονικοποίηση της ΜΔΕ, ώστε η τρέχουσα δισδιάστατη γεωμετρία που εισήχθη στο FEniCS να παράγει παραπλήσια αποτελέσματα με αυτά που παρήχθησαν από την τρισδιάστατη γεωμετρία που εισήχθη στο PTC. Τονίζουμε πάντως ότι βρίσκεται υπό μελέτη η τελική προσέγγιση του τρισδιάστατου μοντέλου από δισδιάστατες προσεγγίσεις που πιθανόν να οδηγήσει σε αναθεώρηση των τιμών που έχουν χρησιμοποιηθεί.

Όπως είναι γνωστό σε αυτόν τον υδροφορέα το μέτωπο υφαλμύρισης εμφανίζεται για τιμή δυναμικού ροής ίση με 128.125, άρα στον προσδιορισμό της θέσης του μετώπου θα πρέπει να αναζητηθούν πεπερασμένα τριγωνικά στοιχεία των οποίων οι τιμές του δυναμικού ροής στις κορυφές βρίσκονται εκατέρωθεν αυτής της τιμής. Αν λάβουμε υπόψη ότι ο συγκεκριμένος υδροφορέας έχει έκταση περίπου 18 τετραγωνικά χιλιόμετρα, τότε καταλαβαίνουμε ότι τα πεπερασμένα στοιχεία του μη δομημένου πλέγματος διακριτοποίησης του θα έχουν ακμές μερικές δεκάδες ή καλύτερα εκατοντάδες μέτρα. Έτσι ο προσδιορισμός της θέσης του μετώπου θα γίνεται με απόκλιση αρκετών εκατοντάδων μέτρων από την πραγματική του θέση αν χρησιμοποιηθούν μόνο οι κορυφές των στοιχείων για αυτό το σκοπό. Αυτό δημιουργεί σημαντικές αποκλίσεις στην εύρεση των βέλτιστων τιμών αντλήσεων των πηγαδιών, διότι η θέση του μετώπου είναι καθοριστική για την αποδοχή ή όχι των δοκιμαστικών τιμών αντλήσεων από τη διαδικασία βελτιστοποίησης τους. Οπότε χρειάζεται ακριβέστερος προσδιορισμός της θέσης του μετώπου στο εσωτερικό των πεπερασμένων στοιχείων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τη χρήση της γραμμικής παρεμβολής μεταξύ των σημείων των δυο πλευρών του πεπερασμένου στοιχείου με τιμή δυναμικού ροής ίση με 128.125. Έτσι θα κατασκευάζεται το τμήμα του μετώπου με μεγαλύτερη ακρίβεια μέσα σε κάθε πεπερασμένο στοιχείο στο εσωτερικό του οποίου διέρχεται το μέτωπο υφαλμύρισης. Η διαδικασία αυτή μπορεί να περιγραφεί συνοπτικά με τον ακόλουθο αλγόριθμο.

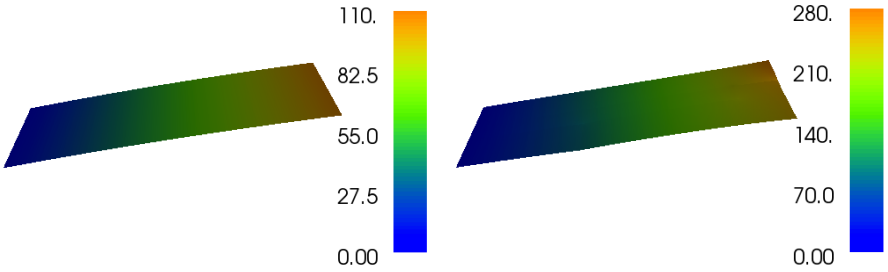
2.3.3 Αλγόριθμος σχεδίασης μετώπου υφαλμύρισης

Βήμα 1: *Εύρεση του πεπερασμένου στοιχείου e_i για $i = 1$ από τα στοιχεία του εξωτερικού συνόρου το οποίο διαπερνά το μέτωπο*
Βήμα 2: *Υπολογισμός σημείων πλευρών του e_i από τα οποία διέρχεται το μέτωπο και σχεδιασμός του με γραμμική παρεμβολή*
Βήμα 3: *Αν το πεπερασμένο στοιχείο e_i δεν είναι στοιχείο εξωτερικού συνόρου εύρεση του πεπερασμένου στοιχείου e_{i+1} από τα γειτονικά στοιχεία του e_i το οποίο διαπερνά το μέτωπο, διαφορετικά εκτέλεση βήματος 5.*
Βήμα 4: *Για $i = i + 1$ εκτέλεση βήματος 2*
Βήμα 5: *Ολοκλήρωση προσδιορισμού μετώπου*

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.3.4 Αποτελέσματα ALOPEX/FEniCS διαχείρισης υδροφορέα Καλύμνου

Το πρόβλημα μοντελοποίησης της υφαλμύρισης του υδροφορέα Καλύμνου, όπως περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα, επιλύθηκε αριθμητικά στη πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Η λύση που παράχθηκε και εμφανίζεται στο Σχήμα 12, αναφέρεται στο δυναμικό ροής κατά τη περίπτωση της φυσικής υφαλμύρισης του υδροφορέα. Το αριστερό γράφημα περιλαμβάνει τη περίπτωση ομοιόμορφης αγωγιμότητας εδάφους, ενώ το δεξί αυτή με τις κυμαινόμενες τιμές σε υποπεριοχές.



Σχήμα 12: Δυναμικό ροής φυσικής υφαλμύρισης προβλήματος Καλύμνου με διαφορετικές προσεγγίσεις ως προς τις υδραυλικές αγωγιμότητες του εδάφους.

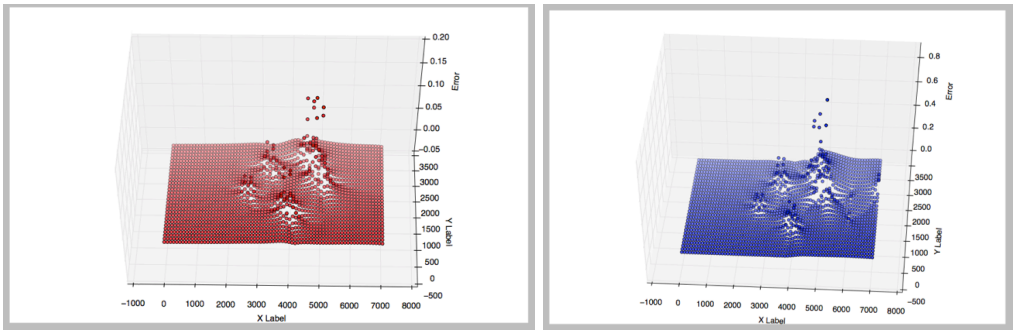
Η χρήση δομημένου πλέγματος διακριτοποίησης επιτρέπει τον υπολογισμό της τάξης σύγκλισης της αριθμητικής μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων. Επειδή τα πολυώνυμα βάσης που έχουν επιλεγεί είναι γραμμικά, αναμένεται η τάξη σύγκλισης να είναι τετραγωνική. Γιαυτό το σκοπό υπολογίστηκε η L_2 νόρμα του σφάλματος μεταξύ διαφόρων διακριτοποιήσεων, οι οποίες σε κάθε εναλλαγή πλέγματος θα διαθέτουν πεπερασμένα στοιχεία διπλάσιου μήκους κάθετων πλευρών κάθε φορά. Η πιο πυκνή διαμέριση είναι αυτή κατά την οποία το μήκος των κάθετων πλευρών των στοιχείων είναι ίση με 6.25 μέτρα. Το σφάλμα κάθε προσεγγιστικής επίλυσης σε κάθε πλέγμα υπολογίστηκε ως προς τη λύση αυτής της διακριτοποίησης. Έτσι επιλύθηκαν προβλήματα με μήκος κάθετων πλευρών των στοιχείων 12.5, 25, 50 και 100 μέτρα για προβλήματα με ενιαία τιμή υδραυλικής αγωγιμότητας και διαφορετικής για κάθε υποχωρίο του υδροφορέα. Στους πίνακες που ακολουθούν εμφανίζονται οι τιμές του σφάλματος και της τάξης σύγκλισης της αριθμητικής μεθόδου για τις περιπτώσεις ομοιόμορφης (αριστερά) και ανομοιόμορφης (δεξιά) υδραυλικής αγωγιμότητας.

h	$\|\|E_h\|\|_2$	Order of conv.
100	6.29e-1	-
50	1.66e-1	1.92
25	4.71e-2	1.82
12.5	9.75e-3	2.27

h	$\|\|E_h\|\|_2$	Order of conv.
100	2.56	-
50	8.55e-1	1.58
25	3.15e-1	1.44
12.5	9.48e-2	1.73

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

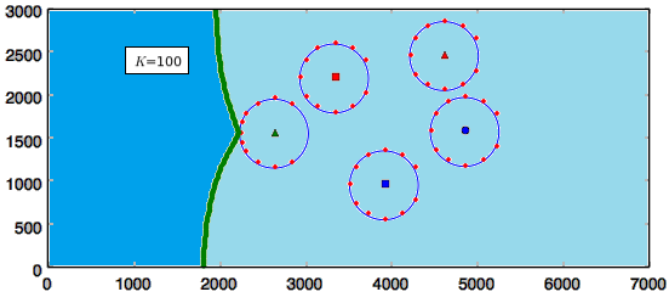
Στο Σχήμα 13 εμφανίζονται τα γραφήματα σφάλματος σε ολόκληρη τη περιοχή του υδροφορέα μεταξύ διακριτοποιήσεων 100 και 6.25 μέτρων. Το αριστερό γράφημα αναφέρεται στη περίπτωση της ομοιόμορφης τιμής υδραυλικής αγωγιμότητας, ενώ το δεξί στη περίπτωση πολλαπλών τιμών υδραυλικής αγωγιμότητας. Όπως παρατηρούμε οι μέγιστες τιμές σφαλμάτων ανήκουν σε κόμβους πλέγματος οι οποίοι βρίσκονται κοντά στα πηγάδια.



Σχήμα 13: Σφάλμα προβλήματος Καλύμνου με διαφορετικές προσεγγίσεις ως προς τις υδραυλικές αγωγιμότητες του εδάφους.

Στη συνέχεια έγινε επίλυση των προβλημάτων με τις δυο προσεγγίσεις κάνοντας χρήση πεπερασμένων στοιχείων μήκους κάθετων πλευρών ίσες με 100 μέτρα.

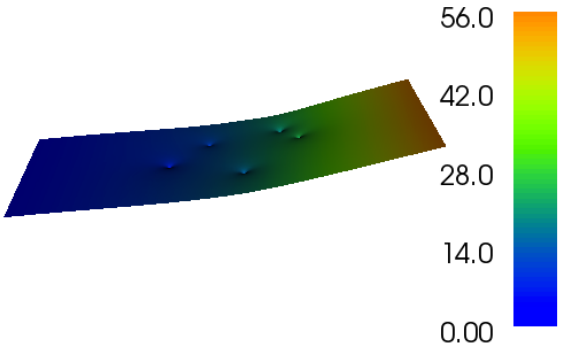
Στην περίπτωση ομοιόμορφης υδραυλικής αγωγιμότητας του υδροφορέα τα αποτελέσματα συνοψίζονται στα Σχήματα 17-21. Πιο συγκεκριμένα, η βέλτιστη θέση του μετώπου, που απεικονίζεται στο Σχήμα 14, προέκυψε στο βήμα 28 της διαδικασίας βελτιστοποίησης και αντιστοιχεί σε συνολική άντληση 3945 m^3/day,



Σχήμα 14: Μέτωπο υφαλμύρισης υδροφορέα για τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.

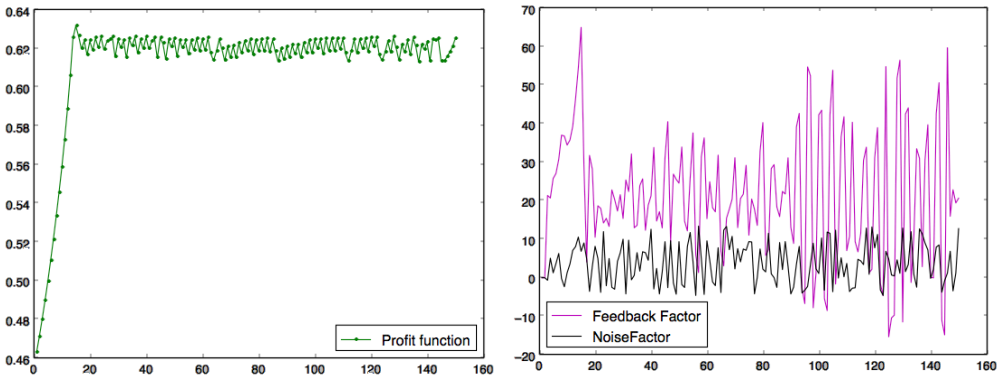
ενώ το δυναμικό ροής που αντιστοιχεί στις βέλτιστες τιμές αντλήσεων επιδεικνύεται στο Σχήμα 15. Επισημαίνουμε ότι οι ανωτέρω βέλτιστες τιμές είναι απολύτως συμβατές με τι αντίστοιχες τιμές του αναλυτικού μοντέλου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

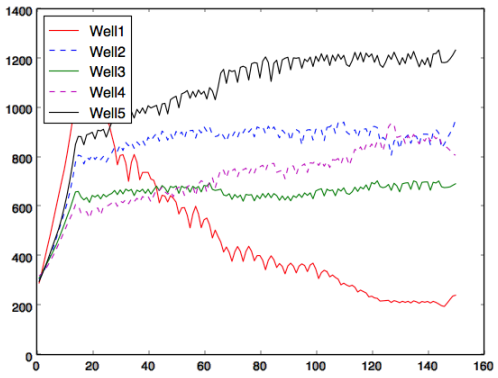


Σχήμα 15: Δυναμικό ροής υδροφορέα για τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.

Η συμπεριφορά του αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX απεικονίζεται στα Σχήματα 16 και 17.



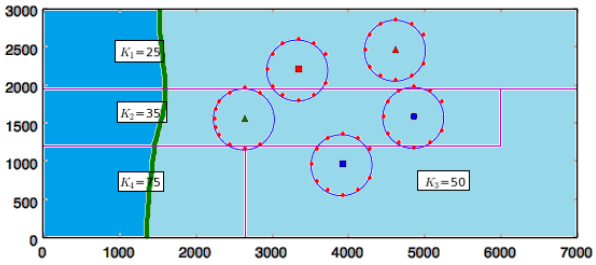
Σχήμα 16: Διακύμανση της αντικειμενικής συνάρτησης (αριστερά) και των όρων noise και feedback (δεξιά) καθ' όλη τη βελτιστοποίηση.



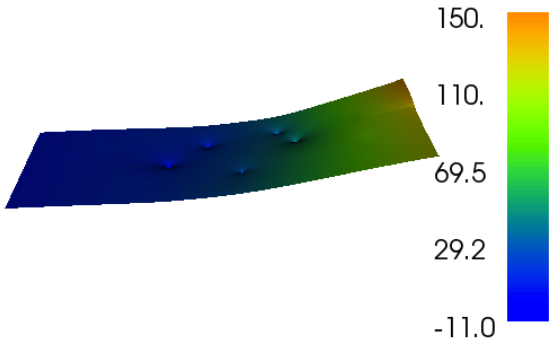
Σχήμα 17: Διακύμανση αντλήσεων ανά πηγάδι καθ' όλη τη βελτιστοποίηση.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

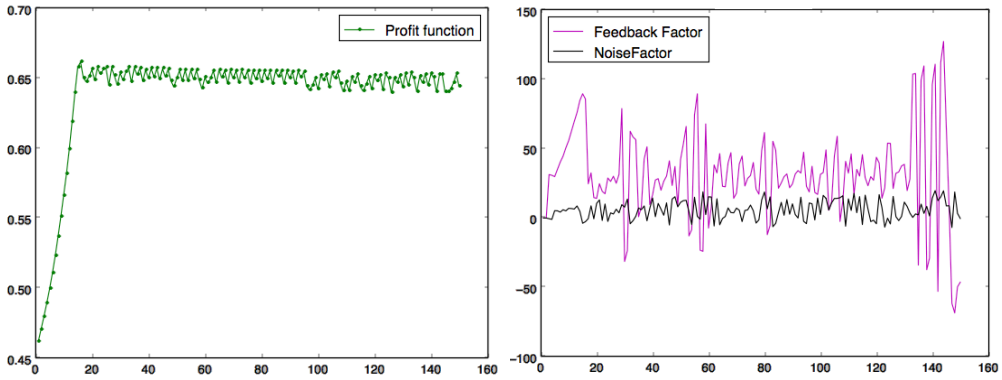
Στην περίπτωση μη ομοιόμορφης υδραυλικής αγωγιμότητας του υδροφορέα τα αποτελέσματα συνοψίζονται στα Σχήματα 18-21. Πιο συγκεκριμένα, η βέλτιστη θέση του μετώπου, που απεικονίζεται στο Σχήμα 18, προέκυψε στο βήμα 15 της διαδικασίας βελτιστοποίησης και αντιστοιχεί σε συνολική άντληση 4412 m^3/day, ενώ το δυναμικό ροής που αντιστοιχεί στις βέλτιστες τιμές αντλήσεων επιδεικνύεται στο Σχήμα 19.



Σχήμα 18: Μέτωπο υφαλμύρισης υδροφορέα για τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.



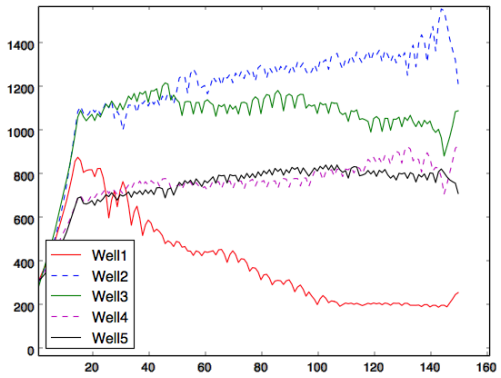
Σχήμα 19: Δυναμικό ροής υδροφορέα για τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.



Σχήμα 20: Διακύμανση της αντικειμενικής συνάρτησης (αριστερά) και των όρων noise και feedback (δεξιά) καθ' όλη τη βελτιστοποίηση.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η συμπεριφορά του αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX απεικονίζεται στα Σχήματα 20 και 21.



Σχήμα 21: Διακύμανση αντλήσεων ανά πηγάδι καθ' όλη τη βελτιστοποίηση.

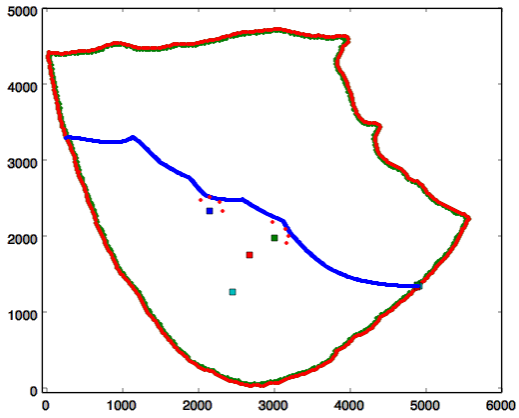
2.3.5 Αποτελέσματα ALOPEX/FEniCS διαχείρισης υδροφορέα Χερσονήσου Κρήτης

Υπενθυμίζουμε ότι στη μελέτη επίλυσης του συγκεκριμένου προβλήματος στην πλατφόρμα λογισμικού FEniCS χρησιμοποιήθηκαν κατάλληλες τιμές στις συνοριακές συνθήκες, καθώς και κατάλληλη κανονικοποίηση της ΜΔΕ, ώστε η τρέχουσα δισδιάστατη γεωμετρία που εισήχθη στο FEniCS να παράγει παραπλήσια αποτελέσματα με αυτά που παρήχθησαν από την τρισδιάστατη γεωμετρία που εισήχθη στο PTC. Επιπλέον θεωρήθηκε ότι ο υδροφορέας τροφοδοτείται με γλυκό νερό μόνο από τις υπόγειες περιοχές και όχι από την επιφάνεια μέσω βροχοπτώσεων. Η αρίθμηση των τεσσάρων πηγαδιών είναι από τη θάλασσα ή το βορά προς το νότο. Στα δυο πρώτα πηγάδια και προς τη πλευρά της θάλασσας έχουν τοποθετηθεί τέσσερα σημεία ελέγχου του μετώπου υφαλμύρισης σε απόσταση περίπου 180 μέτρων από το ανάλογο πηγάδι.

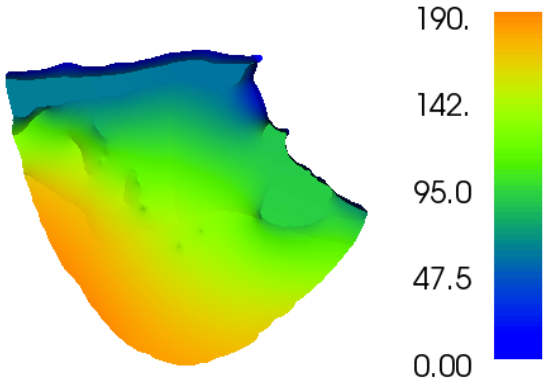
Τα αποτελέσματα της βέλτιστης διαχείρισης από την συνδυαστική εφαρμογή των ALOPEX/FEniCS συνοψίζονται στα Σχήματα 22-25. Πιο συγκεκριμένα, η βέλτιστη θέση του μετώπου, που απεικονίζεται στο Σχήμα 22, προέκυψε στο βήμα 66 της διαδικασίας βελτιστοποίησης και αντιστοιχεί σε συνολική άντληση 4868 m^3/day, ενώ το δυναμικό ροής που αντιστοιχεί στις βέλτιστες τιμές αντλήσεων επιδεικνύεται στο Σχήμα 23. Οι βέλτιστες αντλήσεις κάθε γεώτρησης είναι 1481, 752, 2509 και 126 m^3/day και συγκρίνονται επιτυχώς με τις αντίστοιχες βέλτιστες τιμές (1368, 560, 2519 και 138 m^3/day) που είχαν ληφθεί από την συνδυαστική εφαρμογή των ALOPEX/PTC.

Τέλος, η συμπεριφορά του αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX απεικονίζεται στα Σχήματα 24 και 25.

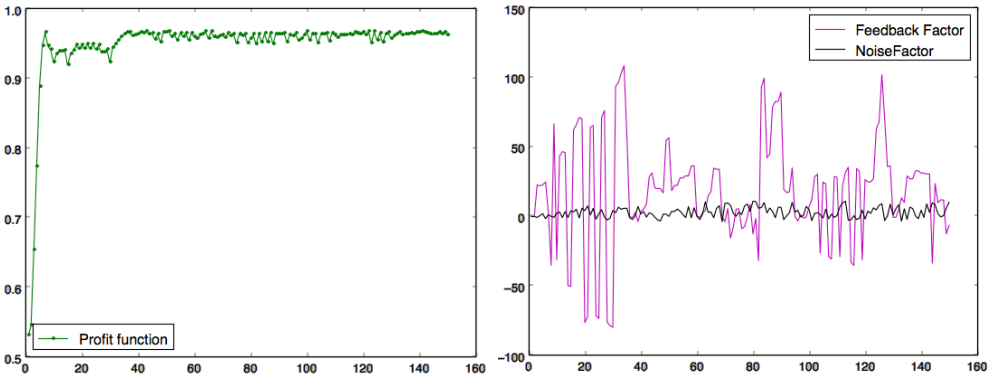
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 22: Μέτωπο υφαλμύρισης υδροφορέα για τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.

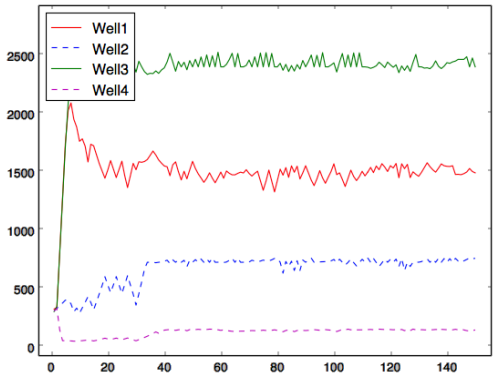


Σχήμα 23: Δυναμικό ροής υδροφορέα για τις βέλτιστες τιμές αντλήσεων.



Σχήμα 24: Διακύμανση της αντικειμενικής συνάρτησης (αριστερά) και των όρων noise και feedback (δεξιά) καθ' όλη τη βελτιστοποίηση.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 25: Διακύμανση αντλήσεων ανά πηγάδι καθ' όλη τη βελτιστοποίηση.

2.4 Αποτελέσματα ALOPEX/Collocation διαχείρισης υδροφορέα Καλύμνου

2.4.1 Hermite Collocation

Στην ενότητα αυτή παραθέτουμε επιγραμματικά, για λόγους πληρότητας, τον σχετικό συμβολισμό της μεθόδου Collocation και υπενθυμίζουμε ότι η ανάπτυξη της μεθόδου παρατίθεται με λεπτομέρεια στην Τεχνικές Εκθέσεις της Δράσης 2.1. Σημειώνουμε ότι στην παρούσα ενότητα μελετάμε το steady state πρόβλημα που σχετίζεται με τον ομογενή ορθογώνιος υδροφορέα ο οποίος προσεγγίζει τον υδροφορέα στο Βαθύ Καλύμνου.

Θεωρώντας μία ομοιόμορφη διαμέριση $N_x \times N_y$ τετραγωνικών χωρίων μήκους h, η HC μέθοδος αναζητά προσεγγιστικές λύσεις $u(x,y) \sim \phi(x,y)$ της μορφής:

$$u(x,t) = \sum_{i=1}^{2N_x+2} \sum_{j=1}^{2N_y+2} \alpha_{ij} \Phi_{ij}(x,y) \tag{28}$$

όπου $\Phi_{ij}(x,y) = \Phi_i(x)\Phi_j(y)$ είναι τα bicubic hermite πολυώνυμα, με κέντρο στον κόμβο (x_i, y_j).

Για τον υπολογισμό των αγνώστων συντελεστών $\alpha_{ij} \equiv \alpha_{ij}(t)$, $i = 1, \ldots, N_x + 1$ και $j = 1, \ldots, N_y + 1$ η μέθοδος Collocation παράγει ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων, όπου η προσεγγιστική λύση $u(x,t)$ απαιτούμε να μηδενίζεται στα $(2N_x + 2) \times (2N_y + 2)$ εσωτερικά και συνοριακά collocation points. Τα απαιτούμενα εσωτερικά collocation points, γνωστά ως Gauss Points, που προκύπτουν ως ρίζες του πολυωνύμου Legendre σε κάθε element $I_{ij} = [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$, δίνονται ως εξής:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

$$\sigma^x_{2i-1} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}} \quad , \quad \sigma^x_{2i} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}}$$
$$\sigma^y_{2j-1} = \frac{y_j + y_{j+1}}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}} \quad , \quad \sigma^y_{2j} = \frac{y_j + y_{j+1}}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}}$$

Παρατηρούμε ότι κάθε element έχει 16 βαθμούς ελευθερίας και υποθέτοντας ότι το K είναι βαθμωτό μέγεθος, οι στοιχειώδεις εξισώσεις μπορούν να γραφούν ως εξής:

$$\begin{aligned} K \sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial x^2}(\sigma^x_K, \sigma^y_L) + \\ + K \sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial y^2}(\sigma^x_K, \sigma^y_L) = (Q - N)(\sigma^x_K, \sigma^y_L) \end{aligned} \tag{29}$$

για $K = 2i-1, 2i$ και $L = 2j-1, 2j$.
Εργαζόμενοι όπως στο [2], οι στοιχειώδεις εξισώσεις σε μορφή πινάκων γράφονται ως εξής:

$$\sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial x^2}(\sigma^x_K, \sigma^y_L) = \left(C^{(2)}_i \otimes C^{(0)}_j \right) \alpha_{ij} \tag{30}$$

και ισοδύναμα,

$$\sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial y^2}(\sigma^x_K, \sigma^y_L) = \left(C^{(0)}_i \otimes C^{(2)}_j \right) \alpha_{ij} \tag{31}$$

όπου $C^{(0),(2)}_i$, $C^{(0),(2)}_j$, τα οποία ορίζονται στα [1], [2] και $\alpha_{ij} = \alpha_i \otimes \alpha_j$ για

$$\alpha_i = [\alpha_{2i-1}(t)\ \alpha_{2i}(t)\ \alpha_{2i+1}(t)\ \alpha_{2i+2}(t)]^T \tag{32}$$

και

$$\alpha_j = [\alpha_{2j-1}(t)\ \alpha_{2j}(t)\ \alpha_{2j+1}(t)\ \alpha_{2j+2}(t)]^T . \tag{33}$$

Επιπροσθέτως, λαμβάνοντας υπόψη τις ιδιότητες των πολυωνύμων hermite με ως προς τις συνοριακές συνθήκες, οδηγούμαστε στις εξισώσεις:

$$\alpha_{1j}(t) = \alpha_{(2N_x+2)j}(t) = \alpha_{i2}(t) = \alpha_{i(2N_y+2)}(t) = 0. \tag{34}$$

Οι παραπάνω στοιχειώδεις και συνοριακές Collocation εξισώσεις, καταλήγουν σε ένα γραμμικό σύστημα της μορφής:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

$$K\left(C^{(2)}\otimes C^{(0)}\right)\boldsymbol{\alpha}+K\left(C^{(0)}\otimes C^{(2)}\right)\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{f} \tag{35}$$

όπου $\boldsymbol{f}=\left[f(\sigma_1^x,\sigma^y),\ f(\sigma_2^x,\sigma^y),\ldots,f(\sigma_{2N_x+2}^x,\sigma^y)\right]$
για $f(x,y)=(Q-N)(x,y)$ και $\sigma^y=\left[\sigma_1^y,\ \sigma_2^y,\ldots,\sigma_{2N_y+2}^y\right]$.

2.4.2 Αριθμητικές προσομοιώσεις και αποτελέσματα

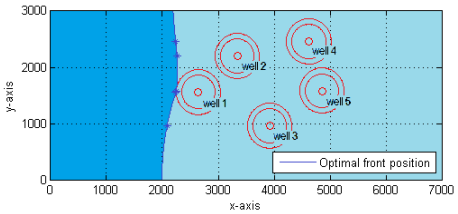
Στην ενότητα αυτή παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα του συνδυαστικού αλγορίθμου Collocation/ALOPEX και τα συγκρίνουμε, μέσω μιας τυπικής διαδικασίας 500 επαναλήψεων, με τα αντίστοιχα αποτελέσματα που παράγουν τόσο ο αλγόριθμος FEniCS/ALOPEX όσο και ο αλγόριθμος Αναλυτικής Λύσης/ALOPEX (βλέπε [23], [24] and [25] καθώς Παράγραφο 2.1.7).

Όπως εύκολα διαπιστώνουμε από τις επιμέρους εικόνες του Σχήματος 26, η προτεινόμενη βέλτιστη λύση σε κάθε περίπτωση, αντιστοιχεί σε ένα σύνολο αντλήσεων, χρησιμοποιώντας τις οποίες όλα τα πηγάδια παραμένουν ασφαλή. Το υφάλμυρο μέτωπο δεν μπορεί να εισχωρήσει εντός της περιοχής ασφάλειας που εμείς ορίσαμε γύρω από κάθε πηγάδι, εξαιτίας της εφαρμογής των φυσικών περιορισμών του προβλήματος. Η αντικειμενική συνάρτηση, σε λιγότερες από 50 επαναλήψεις, και στις τρεις περιπτώσεις, μεγιστοποιείται προσφέροντας έτσι τις μέγιστες δυνατές αντλήσεις. Στη συνέχεια, για το υπόλοιπο της διαδικασίας, οι τιμές της παραμένουν στην περιοχή της μέγιστης τιμής, εξετάζοντας εναλλακτικές αλλά ισοδύναμες βέλτιστες λύσεις. Τέλος, θα πρέπει να επισημάνουμε ότι ο ALOPEX είναι μια στοχαστική διαδικασία, μέσω της οποίας ένα διαφορετικό μονοπάτι ακολουθείται κάθε φορά για την εύρεση της βέλτιστης λύσης. Το γεγονός αυτό εξηγεί τις διαφορές που παρουσιάζουν οι τρεις παραπάνω διαδικασίες στα αποτελέσματά τους τα οποία έχουν συμπεριληφθεί στον Πίνακα 5.

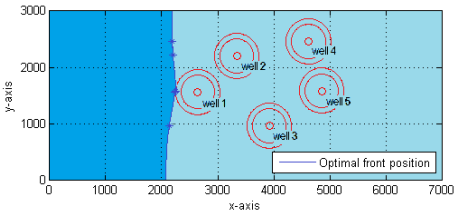
Πίνακας 5: Βέλτιστες Τιμές Αντλήσεων.

Problem Parameters	*Analytical solution optimal values*	*Collocation optimal values*	*FEniCS optimal values*
k *(# iter.)*	161	383	446
$P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	0.62716	0.63195	0.63211
$Q_1^{(k)}$	209.75	201.16	202.62
$Q_2^{(k)}$	1089.32	317.34	695.46
$Q_3^{(k)}$	1069.24	1101.93	1303.02
$Q_4^{(k)}$	306.39	1342.76	376.06
$Q_5^{(k)}$	1287.18	1068.57	1457.01
$S(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	3961.88	4031.76	4034.18

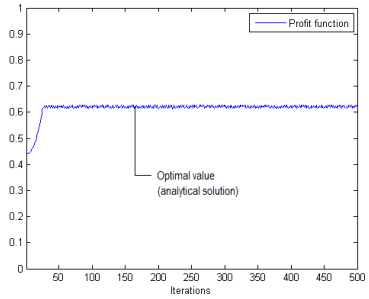
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



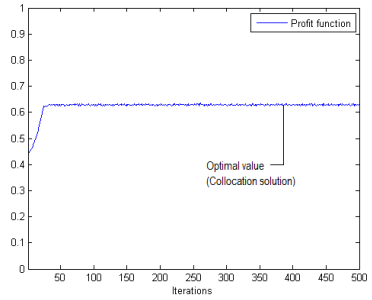
(α΄) Υφάλμυρο μέτωπο, χρησιμοποιώντας την αναλυτική λύση και τις ολικά βέλτιστες αντλήσεις



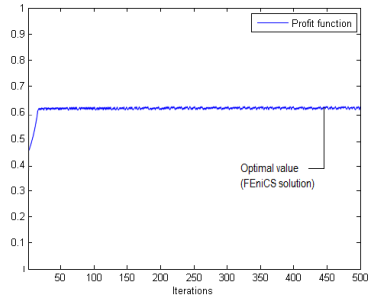
(β΄) Κοινό υφάλμυρο μέτωπο, χρησιμοποιώντας τις Collocation και FEniCS μεθόδους και τις βέλτιστες αντλήσεις.



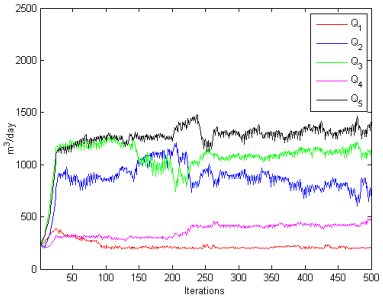
(γ΄) Τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$, χρησιμοποιώντας την αναλυτική λύση.



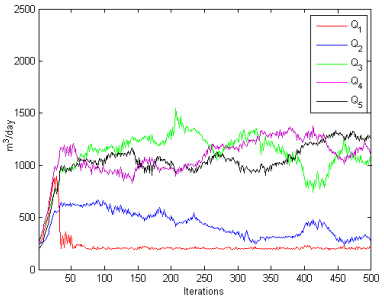
(δ΄) Τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$, χρησιμοποιώντας την Collocation μέθοδο.



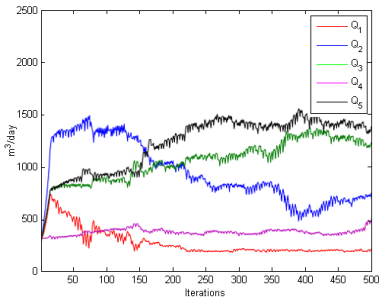
(ε΄) Τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$, χρησιμοποιώντας την FEniCS μέθοδο.



(στ΄) Ρυθμοί άντλησης Q_i των ενεργών γεωτρήσεων, χρησιμοποιώντας την αναλυτική λύση.



(ζ΄) Ρυθμοί άντλησης Q_i των ενεργών γεωτρήσεων, χρησιμοποιώντας την Collocation μέθοδο.



(η΄) Ρυθμοί άντλησης Q_i των ενεργών γεωτρήσεων, χρησιμοποιώντας την FEniCS μέθοδο.

Σχήμα 26: Συμπεριφορά της αναλυτικής λύσης, της Collocation μεθόδου και της FEniCS μεθόδου, σε συνεργασία με τον αλγόριθμο στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX, για την περίπτωση του υδροφορέα της Καλύμνου, σε έναν τυπικό έλεγχο 500 επαναλήψεων.

Κλείνοντας την παράγραφο σημειώνουμε με έμφαση ότι για τις βέλτιστες τιμές που έχουν συμπεριληφθεί στον Πίνακα 5 δεν έχει προηγηθεί ανάλυση ευστάθειας η οποία βρίσκεται σε εξέλιξη. Είναι ενθαρρυντικό ότι φαίνεται να είναι

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

δυνατή η θέσπιση κριτηρίων που να διασφαλίζουν την εκ των προτέρων διασφάλιση της ευστάθειας των αποτελεσμάτων.

3 Μελλοντικές Δράσεις

Στους μελλοντικούς στόχους της ερευνητικής ομάδας του έργου είναι:

- Η θέσπιση κριτηρίων βελτιστοποίησης για την διασφάλιση της ευστάθειας των αποτελεσμάτων
- Η βελτιστοποίηση των παραμέτρων του συστήματος των penalties που συνοδεύει τον αλγόριθμο ALOPEX
- Η ανάπτυξη αλγορίθμων Interface Relaxation / ALOPEX
- Η ανάπτυξη και μελέτη HPC παράλληλων τεχνικών
- Η επέκταση του ALOPEX/FEniCS σε τρισδιάστατα μοντέλα
- Η ανάπτυξη και μελέτη του ALOPEX / dDHC για ετερογενείς υδροφορείς.

Τα παραπάνω αποτελούν ένα μικρό υποσύνολο των ερευνητικών δυνατοτήτων και ερευνητικών θεμάτων που δύνανται πλέον να αντιμετωπιστούν με επιτυχία και αφορούν σε σημαντικά περιβαλλοντικά προβλήματα.

4 Παραδοτέα

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Έχουν δημοσιευτεί τα παρακάτω τρία (3) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές:
  - PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete*, Proc. of INASE-WHH 2015 Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, pp 329-334, 2015.
  - IE Athanasakis, ZA Dokou, EN Mathioudakis, PN Stratis and ND Vilanakis, *Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer*, J Math. Mod. Methods in Applied Sciences, 9, pp. 727-732, 2015

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- PN Stratis, YG Saridakis, MS Zakynthinaki and EP Papadopoulou, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers*, 2nd Intern. Conf. on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012112

Επίσης έχουν υποβληθεί δύο (2) άρθρα για δημοσίευση σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά:

- PN Stratis, GP Karatzas, EP Papadopoulou, MS Zakynthinaki and YG.Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers*, PLOSone (Revised version Submitted 2015)
- PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou, and YG.Saridakis, *PTC Simulations, Stochastic Optimization and Safety Strategies for Groundwater Pumping Management: Case Study of the Hersonissos Coastal Aquifer in Crete*, Applied Water Science (submitted 2015)

5 Συνεργασίες

Η παρούσα εργασία όπως και οι δημοσιεύσεις της που ακολούθησαν, είναι προϊόν συνεργασίας των παρακάτω μελών του Πολυτεχνείου Κρήτης:

- Ι. Σαριδάκης, Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ε. Παπαδοπούλου, Καθηγήτρια, Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ε. Μαθιουδάκης, Επίκουρος Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Γ. Καρατζάς, Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Π. Στρατής, Υποψήφιος Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ζ. Δόκου, Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ι. Αθανασάκης, Υποψήφιος Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Ν. Βιλανάκης, Υποψήφιος Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης

Για την εφαρμογή μεθόδων Interface/Relaxation και Schwarz στα προβλήματα περιβαλλοντικής μηχανικής η ΚΕΟ Πολυτεχνείου Κρήτης συνεργάστηκε με τις ΚΕΟ Πανεπιστημίου Θεσσαλίας και Πατρών. Τα αποτελέσματα της συνεργασίας αναφέρονται στις τεχνικές εκθέσεις άλλων δράσεων.

Αναφορές

[1] I. Athanasakis, M. Papadomanolaki, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, pp241-246

[2] I. Athanasakis, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation*, Proceedings of The World Congress on Engineering 2015, pp137-142

[3] S. Alimohammadi and A. AfsharUnit, *Response Matrix Coefficients Development; ANN Approach*, Proceedings of the 5th WSEAS/IASME Int. Conf. on Systems Theory and Scientific Computation, pp.17-25, Malta, September 15-17, 2005.

[4] R. Ababou and A. Al-Bitar, *Salt water intrusion with heterogeneity and uncertainty: mathematical modeling and analyses*, Developments Water Sci., 55:1559-1571, 2004.

[5] M. Aivalioti and G. Karatzas, *Modeling the flow and leachate transport in the vadose and saturated Zone - A field application*, Env Model Assess., 11(1):81-87, 2006.

[6] D. Babu, G. Pinder, A. Niemi, D. Ahlfeld and S. Stothoff, *Chemical transport by three-dimensional groundwater flows*, Princeton University, 84-WR-3, USA, 1997.

[7] Z. Dokou and G. Karatzas, *Saltwater intrusion estimation in a karstified coastal system using density-dependent modelling and comparison with the sharp-interface approach*, Hydrol. Sci. J., 57(5):985-999, 2012.

[8] Z. Dokou and G. Pinder, *Extension and field application of an integrated DNAPL source identification algorithm that utilizes stochastic modeling and a Kalman filter*, J. Hydrol., 398(3-4):277-291, 2011.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[9] V. Guvanase, S. Wade and M. Barcelo, *Simulation of regional ground water flow and salt water intrusion in Hernando County*, Florida, Ground Water, 38(5):772-783, 2000.

[10] C.W. Fetter, *Applied Hydrogeology*, Merrill Publishing Company, 1988.

[11] E. Harth and E. Tzanakou, *Alopex: A stochastic method for determining visual receptive fields*, Vision Research, 14, pp.1475, B1482, 1974.

[12] G. Karatzas and Z. Dokou, *Managing the saltwater intrusion phenomenon in the coastal aquifer of Malia, Crete using multi-objective optimization*, Hydrogeology, 2015, accepted.

[13] S. Karterakis, G. Karatzas, I. Nikolos and M. Papadopoulou *Application of linear programming and differential evolutionary optimization methodologies for the solution of coastal subsurface water management problems subject to environmental criteria*, J. Hydrol., 342(3-4):270-282, 2007.

[14] M. Koukadaki, G. Karatzas, M. Papadopoulou and A. Vafidis, *Identification of the saline zone in a coastal aquifer using electrical tomography data and simulation*, Water Resour. Manag., 21(11):1881-1898, 2007.

[15] A. Mantoglou, *Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion*, Water Resources Research, ISSN 0043-397, 39(12), 2003.

[16] A. Mantoglou and M. Papantoniou, *Optimal Design Of Pumping Networks In Coastal Aquifers Using Sharp Interface Models*, J. Hydrol., 361:52-63, 2008.

[17] A. Mantoglou, M. Papantoniou and P. Giannoulopoulos, *Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms*, J. Hydrol., 297(1-4):209-228, 2004.

[18] J. Ospina, N. Guarin and M. Velez, *Analytical Solutions for Confined Aquifers with non constant Pumping using Computer Algebra*, Proceedings of the 2006 IASME/WSEAS Int. Conf. on Water Resources, Hydraulics & Hydrology, pp.7-12, Chalkida, Greece, May 11-13, 2006.

[19] M. Papadopoulou, E. Varouchakis and G. Karatzas, *Simulation of complex aquifer behaviour using numerical and geostatistical methodologies*, Desalination, 237:42-53, 2009.

[20] M. Papadopoulou, E. Varouchakis and G. Karatzas, *Terrain Discontinuity Effects in the Regional Flow of a Complex Karstified Aquifer*, Environ. Model Assess, 15(5):319-328, 2010.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[21] O.D.L. Strack, *Groundwater Mechanics*, Prentice Hall, 1989.

[22] P. Stratis, Y. Saridakis, E. Papadopoulou and M. Zakynthinaki, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in freshwater coastal aquifers*, Journal of Physics: Conference Series, 490, 012112, 2014.

[23] P. Stratis, Z. Dokou, G. Karatzas, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete*, Procs. of INASE/CSCC-WHH 2015, Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, 329-334, Zakynthos, 2015.

[24] P. Stratis, Z. Dokou, G. Karatzas, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *PTC Simulations, Stochastic Optimization and Safety Strategies for Freshwater Pumping Management: Case Study of the Hersonissos Coastal Aquifer in Crete*, Applied Water Sciences, September 2015, submitted.

[25] P. Stratis, G. Karatzas, E. Papadopoulou, M. Zakynthinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers*, 2015, (PLOSone submitted).

[26] T. Reilly and A. Goodman, *Quantitative-Analysis of Saltwater Fresh-Water Relationships in Groundwater Systems - a Historical-Perspective*, J. Hydrol., 80(1-2):125-160, 1985.

[27] K. Voudouris, D. Mandilaras and A. Antonakos, *Methods to define the areal distribution of the salt intrusion: Examples from South Greece*, 18 SWIM. Cartagena, Spain. (Ed. Aragus, Custod Io and Manzano), 2004.

[28] M. Zakynthinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for a tip-tilt adaptive correcting system*, Comp. Phys. Commun., 150(3) 274, 2003.

[29] *http://www.fenicsproject.org*.

[30] Logg, Anders, Mardal, Kent-Andre, Wells, Garth *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, Springer, (84), 2012.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Ι΄ Τελική Έκθεση Αξιολόγησης

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Έκθεση Αξιολόγησης

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multiphysics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 5

ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας Περιεχομένων

1 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΦΥΣΙΚΟΥ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟΥ & ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΕΠΡΑΓΜΕΝΩΝ 3

1.1 ΔΡΆΣΗ 1: ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ ΕΡΓΟΥ.....3
1.2 ΔΡΆΣΗ 2.1: ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ/ΑΣΥΝΕΧΕΙΣ ΜΕΘΟΔΟΙ COLLOCATION 4
1.3 ΔΡΆΣΗ 2.2: ΜΕΘΟΔΟΙ ΧΑΛΑΡΩΣΗΣ ΣΤΙΣ ΔΙΕΠΑΦΕΣ - ΜΧΔ 6
1.4 ΔΡΆΣΗ 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ 8
1.5 ΔΡΆΣΗ 2.4: ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΦΩΚΑ.....10
1.6 ΔΡΆΣΗ 3.1: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ CLUSTERS, GRIDS ΚΑΙ CLOUDS 12
1.7 ΔΡΆΣΗ 3.2: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES).....15
1.8 ΔΡΆΣΗ 4.1: ΣΥΓΚΕΡΑΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ.17
1.9 ΔΡΆΣΗ 4.2: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ 19
1.10 ΔΡΆΣΗ 4.3: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ 21
1.11 ΔΡΆΣΗ 6: ΔΙΑΧΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ 24

2 ΣΥΝΟΨΗ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ 27

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Περιγραφή Φυσικού Αντικειμένου & Ανάλυση Πεπραγμένων

Το επιστημονικό αντικείμενο του Προγράμματος αυτού συνίσταται σε τρεις διαφορετικές επιστημονικές περιοχές: 1) Στην επίλυση Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ), με αρχικές ή/και συνοριακές συνθήκες, με μη συνεχείς συντελεστές και ορισμένες σε ανομοιογενή χωρία. Οι μέθοδοι που αναπτύχθηκαν είναι κυρίως αριθμητικές μέθοδοι καθώς και η μέθοδος Μετασχηματισμού Φωκά. 2) Στην ανάπτυξη κατάλληλων υπολογιστικών τεχνικών και υλοποίηση των μεθόδων σε κατάλληλα σειριακά και παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα. 3) Στην εφαρμογή των μεθόδων αυτών σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής, όπως η υφαλμύρινση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης και η διάδοση πρωτογενών καρκινικών όγκων εγκεφάλου.

Το ερευνητικό έργο υλοποιήθηκε από τρεις ερευνητικές ομάδες: Την ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1), ως την κύρια ερευνητική ομάδα, και τις ομάδες του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας (ΚΕΟ 2) και του Πανεπιστημίου Πατρών (ΚΕΟ 3).

Πιο συγκεκριμένα, ανά Δράση το Πρόγραμμα υλοποιήθηκε ως εξής:

1.1 Δράση 1: ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ ΕΡΓΟΥ

Συντονιστής του έργου σε όλη τη διάρκεια ήταν ο Καθηγητής Ι. Σαριδάκης, υπεύθυνος της 1ης ερευνητικής ομάδας (Πολυτεχνείο Κρήτης). Υπεύθυνος της ερευνητικής ομάδας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ήταν ο Καθηγητής Η. Χούστης και της ερευνητικής ομάδας του Πανεπιστημίου Πατρών, ο Καθηγητής Σ. Λυκοθανάσης. Κατά τη διάρκεια του έργου έγιναν 7 τακτικές συναντήσεις του συντονιστή με τους υπευθύνους των άλλων ομάδων, για την παρακολούθηση της πορείας του φυσικού και οικονομικού αντικειμένου, για το συντονισμό των συνεργασιών καθώς και για την επίλυση έκτακτων θεμάτων. Έγιναν 3 τακτικές ερευνητικές συναντήσεις όπου συμμετείχαν όλα τα μέλη των ερευνητικών ομάδων και 6 έκτακτες συναντήσεις. Στις συναντήσεις αυτές, μέλη παρουσίαζαν τα μέχρι εκείνη τη στιγμή ερευνητικά τους αποτελέσματα και έθεταν τους επόμενους στόχους. Με τις συναντήσεις αυτές καθώς και με άλλου είδους επικοινωνία όπως τηλεδιασκέψεις, επιτεύχθηκε μια καλή όσμωση των ερευνητικών ομάδων που είχε ως συνέπεια την παραγωγή υψηλού επιπέδου ερευνητικού έργου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής: τρεις Ετήσιες Εκθέσεις Προόδου, καθώς και η Τελική Έκθεση Πεπραγμένων και Μελλοντικής Συνεργασίας.

1.2 Δράση 2.1: ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ/ΑΣΥΝΕΧΕΙΣ ΜΕΘΟΔΟΙ COLLOCATION

Η Δράση 2.1 αφορά στην έρευνα για την ανάπτυξη Υβριδικών - Ασυνεχών Μεθόδων Collocation με στόχο την επίλυση μη κλασικών ΜΔΕ πολλαπλών χωρίων (multiphysics, multidomain). Χαρακτηριστικά στοιχεία τους οι ασυνεχείς συντελεστές και τα ανομοιογενή χωρία. Τα προβλήματα αυτά προκύπτουν από τη μοντελοποίηση της εξέλιξης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο καθώς και από την εισβολή θαλασσινού νερού σε παράκτιους υπόγειους υδροφορείς. Περιγράφονται δε, γενικά, από μία μη γραμμική παραβολική ή ελλειπτική ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης στις διεπαφές.

Η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης ανέπτυξε κατ' αρχήν βασικά μαθηματικά εργαλεία που είναι:

- Η εισαγωγή μίας νέας βάσης κυβικών πολυωνύμων παρεμβολής Hermite με ασυνεχή παράγωγο στα σημεία διεπαφής, που προσομοιώνει συμπεριφορά των λύσεων σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων.
- Την παραγωγή των βασικών πινάκων Collocation, σε επίπεδο στοιχείων και σε επίπεδο συντελεστών του παραγόμενου συστήματος, που αντιστοιχούν στους γραμμικούς όρους της ασυνεχούς ΜΔΕ σε μία χωρική διάσταση.
- Την παραγωγή των βασικών πινάκων Collocation για ασυνεχείς ΜΔΕ σε δύο χωρικές διαστάσεις με χρήση τανυστικών γινομένων (tensorproducts).
- Την παραγωγή των βασικών πινάκων Collocation που αντιστοιχούν στους μη-γραμμικούς όρους της ασυνεχούς ΜΔΕ με χρήση γινομένων Hadamard.

Έγινε κατάλληλος συνδυασμός των εργαλείων αυτών με αποτέλεσμα την ανάπτυξη της νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου, για την επίλυση Προβλημάτων Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών Πολλαπλών Πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) στις περιπτώσεις:

- Γενικευμένων γραμμικών και μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 (μία χρόνου + μία χωρική) διαστάσεις όπου διαπιστώθηκε σύγκλιση τέταρτης τάξης.
- Γενικευμένων γραμμικών και μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις, με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης ως

προς τη μία διάσταση με σύγκλιση τετάρτης τάξης.

- Γενικευμένων γραμμικών και μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με γενικό ασυνεχή συντελεστή διάχυσης, όπου διαπιστώθηκε μείωση της τάξης σύγκλισης στις εσωτερικές γωνίες. Αυτό αντιμετωπίστηκε με προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με μία νέα γενικευμένη κυβική συνάρτηση στις δύο διαστάσεις.

Η προτεινόμενη μέθοδος Collocation συνδυάστηκε με κατάλληλα υψηλής τάξης σχήματα διακριτοποίησης Runge-Kutta (Diagonally Implicit, Strong Stability Preserving, Implicit-Explicit) ως προς το χρόνο.

Μελετήθηκε επίσης η απεικόνιση των μεθόδων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα και κατασκευάστηκαν νέοι παράλληλοι αλγόριθμοι, κατάλληλοι για περιβάλλοντα CPU-GPU. Ως μέθοδοι για την επίλυση των παραγόμενων Γραμμικών Συστημάτων, χρησιμοποιήθηκε η προρρυθμισμένη BiCGSTAB επαναληπτική μέθοδος, όπου παρατηρήθηκε σημαντική επιτάχυνση.

Τέλος, σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, αναπτύχθηκε μία υβριδική μέθοδος Collocationη οποία χρησιμοποιεί Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ) για την αντιμετώπιση των ασυνεχειών.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 5 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων, εκ των οποίων δυο πήραν το βραβείο καλύτερης δημοσίευσης:

1. IE Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013, Vol I, pp 241-246, WCE-ICAEM 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.
2. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, *Discontinuous Hermite Collocation and IMEX Runge-Kutta for a Treated Quasi-linear Heterogeneous Brain Tumor Model,* Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 183-188, 2015
3. EN Mathioudakis, ND Vilanakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Parallel Iterative Solution of the Hermite Collocation Equations on GPUs,* Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol II, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K. (Best Paper Award)
4. IE Athanasakis, EP Papadopoulou and YG.Saridakis, *Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a*

Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015, Vol I, pp. 137-142, WCE-ICAEM 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

5. N. Vilanakis and E. Mathioudakis, *Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs II,* 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012097

Επισημαίνουμε ότι υπάρχουν και άλλες σχετικές εργασίες με το γνωστικό αντικείμενο της δράσης που αναφέρονται σε άλλες δράσεις.

- Παραδόθηκε και είναι διαθέσιμο προς χρήση από κάθε ενδιαφερόμενο, το παραγόμενο λογισμικό επαλήθευσης και εφαρμογής των μεθόδων.

Τα παραδοτέα αυτά υπερκαλύπτουν τα υποσχόμενα παραδοτέα της πρότασης.

1.3 Δράση 2.2: ΜΕΘΟΔΟΙ ΧΑΛΑΡΩΣΗΣ ΣΤΙΣ ΔΙΕΠΑΦΕΣ - ΜΧΔ

Η Δράση αυτή αφορά στην ανάπτυξη και μελέτη νέων προχωρημένων μεθόδων χαλάρωσης στις διεπαφές σε ανομοιογενή χωρία, κατάλληλων για προβλήματα σύνθετων ΜΔΕ για την αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές τους. Υλοποιήθηκαν οι επιμέρους στόχοι:

- Ανασκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων (multi-domain, multi-physics problems, MDMP problems) με έμφαση σε προβλήματα Ιατρικής και την Περιβαλλοντικής Φυσικής.
- Ανασκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα.
- Έγινε πειραματική μελέτη των αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη κανονικά πεδία με στόχο την προσέγγιση των σύνθετων γεωμετριών όπως η λευκή και φαιά ουσία στην περιοχή του εγκεφάλου για το πρόβλημα της Ιατρικής και η αλλαγή στη σύσταση του υπεδάφους στο πρόβλημα της Περιβαλλοντικής Φυσικής.
- Υλοποιήθηκαν τα παραπάνω στα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής

Αρχικά, μελετήθηκαν steady state ελλειπτικά προβλήματα και υλοποιήθηκαν σε λογισμικό FEniCS.

Στη συνέχεια έγινε χρήση ΜΧΔ για παραβολικά προβλήματα ξανά σε λογισμικό FEniCS. Μελετήθηκε η συμπεριφορά τους τόσο σε προβλήματα μοντέλα όσο και για το πρόβλημα του εγκεφάλου, με καλά αποτελέσματα αντίστοιχα με εκείνα της ασυνεχούς μεθόδου Collocation.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:

1. M. Vavalis, M. Mu, G. Sarailidis, *Finite element simulations of window Josephson junctions*, J Comp Applied Math, 236, pp3186-3197, 2012
2. P. Tsompanopoulou, *Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems*, 6th International Conference on Numerical Analysis(NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece. pp 260-265.
3. A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis, *An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems*, International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), Rhodes, Greece, Sept. 23-29, 2015.

Επισημαίνουμε ότι υπάρχουν και άλλες σχετικές εργασίες με το γνωστικό αντικείμενο της δράσης που αναφέρονται σε άλλες δράσεις. Για παράδειγμα:

- A.Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, *Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method*, 6*th* International Conferenceon Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp167-173.
- IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for theSolution of PDEs, A. Korfiati, N. Sfika, K. Daloukas, C. Alexakos, P. Tsompanopoulou,S. Likothanassis, The 2015 International Conference of Parallel and DistributedComputing (ICPDC 215), July 1-3, 2015, London, U.K.

- Παραδόθηκε πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων:

1. Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.
2. Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την εύρεση των interface points σε μη κανονικές γεωμετρίες με χρήση των KD trees.
3. Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για τη δημιουργία γραφικών παραστάσεων των επιμέρους λύσεων στο αρχικό χωρίο του προβλήματος.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα παραδοτέα αυτά υπερκαλύπτουν τα υποσχόμενα παραδοτέα της πρότασης.

Κύρια ερευνητική ομάδα αυτής της δράσης είναι η ΚΕΟ 2 του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας. Αναπτύχθηκε όμως ευρεία συνεργασία με μέλη από άλλες ερευνητικές ομάδες: Με την ΚΕΟ 1 Πολυτεχνείου Κρήτης, κυρίως για την υλοποίηση των ΜΧΔ μέσα σε μεθόδους Collocation για την επίλυση παραβολικών προβλημάτων με ασυνέχεια στην παράγωγο. Με την ομάδα ΚΕΟ 3 Πανεπιστημίου Πατρών για τον έλεγχο και την επαλήθευση των μεθόδων ΜΔΧ για την επίλυση προβλημάτων με πολλαπλά χωρία και φυσικά μοντέλα με μεθόδους Πεπερασμένων Στοιχείων μέσα από την πλατφόρμα FEniCS σε σειριακή, παράλληλη και ασύγχρονη εκδοχή τόσο για ελλειπτικά όσο και για παραβολικά προβλήματα. Και οι τρεις ερευνητικές ομάδες συνεργάστηκαν για την εφαρμογή ΜΔΧ στο πρόβλημα της υπεράντλησης νερού, από την Περιβαλλοντική Μηχανική. Η έρευνα πάνω στις ΜΧΔ κυρίως με τεχνικές POB και GEO, φαίνεται ότι είναι υποσχόμενη να δώσει και μελλοντικά, σοβαρά θεωρητικά και πρακτικά αποτελέσματα.

1.4 Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Η Δράσης 2.3 αφορά στην ανάπτυξη υβριδικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ οι οποίες θα αποτελούνται από τον συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo, για την κατάτμηση του αρχικού σύνθετου προβλήματος ΜΔΕ σε ένα σύνολο ανεξάρτητων υπο-προβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων όπως πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων διαφορών για την προσέγγιση των λύσεων των υπο-προβλημάτων.

Έγινε υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα. Αυτή παρουσιάζει ενδιαφέρον λόγω της φύσης των στοχαστικών μεθόδων να είναι παραλληλίσιμες, αλλά και για το λόγο ότι τα σχήματα αυτά έχουν πλεονεκτήματα ως προς τη δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα.

Στα πλαίσια της Δράσης 2.3, πραγματοποιήθηκε μελέτη των αλγορίθμων ΜΧΔ με ασύγχρονη συμπεριφορά. Σε κάθε επανάληψη, η επίλυση των επιμέρους προβλημάτων, αλλά και η χαλάρωση στις διεπαφές, μπορεί να πραγματοποιηθεί παράλληλα για όλα τα υποχωρία. Η παραλληλισιμότητα μπορεί να αντιμετωπισθεί συγχρονισμένα αλλά και εντελώς ασύγχρονα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Μελετήθηκε η μέθοδος Cholesky καθώς και τεχνικές για την αποδοτικότερη υλοποίησή της σε μνήμες στερεάς κατάστασης (non-volatile memories). Διερευνήθηκε η χρήση ενδιάμεσων buffers για την πραγματοποίηση μαζικών (batch) εγγραφών και αναγνώσεων των στοιχείων πλήρωσης, καθώς και οι δυνατότητες προ-ανάκτησής τους (pre-fetching) στα διάφορα στάδια της παραγοντοποίησης. Πραγματοποιήθηκε, επίσης, πειραματική επαλήθευση των προτεινόμενων βελτιστοποιήσεων. Στα πειράματα χρησιμοποιήθηκαν και αραιοί πίνακες που προέκυψαν από τα ερευνητικά αποτελέσματα του έργου.

Στο επίπεδο της υλοποίησης οικοδομήθηκε η εμπειρία σε θέματα διατύπωσης, υλοποίησης και πειραματικής μεθοδολογίας μετα-μεθόδων, που εκμεταλλεύονται τις ιδιαιτερότητες των επιμέρους προβλημάτων που συνθέτουν το αρχικό πρόβλημα. Τα αποτελέσματα της Δράσης 2.3 αξιοποιήθηκαν σε όλες σχεδόν τις δραστηριότητες της Δράσης 4.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 4 επιστημονικά άρθρα σε διεθνή περιοδικά και σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων.

1. Manolis Vavalis, *Real Valued Block SOR Iterative Methods for the Helmholtz Equation*, Intern. J Num. Methods & Appl., 10(3), 99-126, 2013
2. Manolis Vavalis and Giorgos Sarailidis, *On the Stochastic/Deterministic Numerical Solution of Composite Deterministic Elliptic PDE Problems*, Inter. J of Math.l Models and Methods in Applied Science, 9, 740-747, 2015
3. E. Maroudas, N. Vilanakis, Ch. Antonopoulos, E. Mathioudakis, Y. Saridakis and M. Vavalis, *Schwarz Splitting For The Steady State Problem Of Saltwater Intrusion In Coastal Aquifers*, Inter. J of Math.l Models and Methods in Applied Science, 9, 733-739, 2015
4. Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, and Panayiotis Bozanis, *A Study of Sparse Matrix Methods on New Hardware: Advances and Challenges*, International Journal of Monitoring and Surveillance Technologies Research (IJMSTR), in press.

Άλλες σχετικές εργασίες που αναφέρονται σε άλλες δράσεις είναι για παράδειγμα οι:

- Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, ”On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems”, Journal of Mathematics and Statistical Science. Accepted 10/2015, in press.
- P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, “Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains”,

Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

- A. Korfiati, S. Likothanassis, P. Alefragis, K. Daloukas, P. Tsompanopoulou, *An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain/Multi-physics Problems*, 13th International Conference of Numerical Analysis & Applied Mathematics,Sept 23-29, 2015, Rhodes, Greece.

➢ Το παραγόμενο λογισμικό που βρίσκεται στους ιστοχώρους:

1. https://github.com/mvavalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers και
2. https://github.com/mvavalis/multidomain_multiphysics.
3. Ιστοσελίδα του έργου

Στη δράση αυτή αναπτύχθηκαν εντατικές, αμφίπλευρες και εκτενείς συνεργασίες με όλα σχεδόν τα μέλη της ομάδας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας και του Πολυτεχνείου Κρήτης καθώς και μονόπλευρη συνεργασία με μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Πάτρας. Αναπτύχθηκαν επίσης συνεργασίες με εξωτερικά μέλη από Ελλάδα και εξωτερικό, που δεν υπάγονται στο ερευνητικό έργο.

1.5 Δράση 2.4: ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΦΩΚΑ

Η Δράση αυτή αφορά στη μελέτη και προσαρμογή της καινοτόμου μαθηματικής μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές. Περιλαμβάνεται η ανάπτυξη αναλυτικών ή αριθμητικών μεθόδων επίλυσης των γενικευμένων συνθηκών ή των αντίστοιχων Dirichlet-Neumann απεικονίσεων στην περίπτωση ασυνεχών συντελεστών και η ανάπτυξη λύσεων κλειστής μορφής ως προς τον χρόνο σε ευαίσθητα προβλήματα, όπως εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου.

Προσαρμόστηκε και επεκτάθηκε η μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά ώστε να λύνει σε κλειστή μορφή γραμμικά Προβλήματα Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών Πολλαπλών Πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) που χαρακτηρίζονται από ασυνεχή συντελεστή διάχυσης και συνεπώς από ασυνεχή παράγωγο. Η μεθοδολογία και τα βασικά εργαλεία που αναπτύχθηκε περιγράφονται ως εξής:

➢ Έγινε διακριτοποίηση στο αρχικό πρόβλημα σε υποχωρία που ο συντελεστής διάχυσης παραμένει συνεχής και επομένως η λύση ικανοποιεί ιδιότητες αναλυτικής συνάρτησης. Θεωρώντας κατάλληλες συνοριακές συνθήκες στα άκρα του υποχωρίου, που είναι και σημεία διεπαφής, έχει δοθεί σε κλειστή μορφή τη λύση του ΠΑΣΣ σε κάθε υποχωρίο, μέσω της επέκτασης του κλασσικού φορμαλισμού της μεθόδου

Φωκά και μέσω μίας νέας ολικής συνθήκης. Η λύση εξαρτάται από την αρχική συνθήκη, αλλά και από τιμές της συνάρτησης και της παραγώγου στις διεπαφές που παραμένουν άγνωστες.

- Οι σχέσεις της ολικής συνθήκης και κατάλληλοι μετασχηματισμοί τους, παράγουν ένα γραμμικό σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων για τον υπολογισμό των άγνωστων ποσοτήτων που ολοκληρώνει την επίλυση ενός ΠΑΣΣ-ΠΠ σε κλειστή μορφή.
- Χρησιμοποιήθηκε αριθμητική παραγώγιση σε υπερβολικές καμπύλες για την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης, με εκθετική τάξη σύγκλισης.
- Για προβλήματα με ασυνέχειες στο χρόνο χρησιμοποιήθηκαν κατάλληλες τεχνικές επανέναρξης της διαδικασίας με νέες αρχικές συνθήκες.

Με κατάλληλους συνδυασμούς των παραπάνω, επιτεύχθηκε η λύση σε κλειστή μορφή σύνθετων γραμμικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στη χρονική και σε μια χωρική(1+1) διάσταση.

Για την επέκταση των παραπάνω αποτελεσμάτων σε μη γραμμικά προβλήματα καθώς και σε προβλήματα σε δύο χωρικές (1+2) διαστάσεις, η συνεργαζόμενη ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Cambridge και Notre Dame μελέτησε την επέκταση της μεθόδου Φωκά για:

- Τη γραμμική και μη γραμμική ΜΔΕ του Schrödinger στις 1+1 διαστάσεις με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev.
- Την επέκταση της γραμμικής εξίσωσης της θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις με πλάγιες Neumann συνοριακές συνθήκες.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 4 επιστημονικά άρθρα σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά και σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:

1. D.Mantzavinos MG Papadomanolaki, AG Sifalakis and YG Saridakis, *Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions*, J Applied Numerical Mathematics (2014), in press, http:/dx.doi.org/10.1016/j.apnum. 2014.09.006
2. M Asvestas, AG Sifalakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity,* 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012143.
3. M Asvestas, EP Papadopoulou, AG Sifalakis and YG Saridakis,*The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with*

Discontinuous Time Dependent Parameters, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.

4. AS Fokas, A Alexandrou Himonas and D. Mantzavinos, *The Nonlinear Schrödinger equation on the half line,* Transactions of AMS, (accepted)

Στα πλαίσια του έργου εντάσσεται και το άρθρο: D. Mantzavinos and A.S. Fokas, *The Unified Transform For The Heat Equation: II. Non-Separable Boundary Conditions In Two Dimensions,* European J Applied Math, 2015 (http://dx.doi.org/10.1017/S0956792515000224). Το άρθρο δεν μπορεί να θεωρηθεί ως παραδοτέο λόγω μη-ορθής σήμανσης.

Τέλος, άλλα άρθρα που πραγματεύονται την μέθοδο Φωκά έχουν δημοσιευτεί σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων αλλά αποδίδονται ως παραδοτέα της δράσης 4.2.

Τα παραδοτέα αυτά υπερκαλύπτουν τα υποσχόμενα παραδοτέα της πρότασης.

Σημαντικότατη ήταν η συνεργασία με τον Καθηγητή Α. Φωκά του Πανεπιστημίου Cambridge, ως μετακαλούμενου Έλληνα ερευνητή του προγράμματος ο οποίος συμμετείχε σε όλα τα αποτελέσματα της δράσης. Καθοριστική επίσης ήταν και η συνεργασία με τον ερευνητικό συνεργάτη Δ. Μαντζαβίνο του Πανεπιστημίου Notre Dame.

1.6 Δράση 3.1: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ CLUSTERS, GRIDS ΚΑΙ CLOUDS

Η Δράση 3 αναφέρεται γενικά στη χρήση σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών αφενός μεν στην υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων και του αντίστοιχου επιστημονικού λογισμικού, που θα αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της Δράσης 2 (ιδιαίτερα 2.2 και 2.3), αφετέρου δε στην ανάπτυξη της πλατφόρμας λογισμικού της Δράσης 4. Η υλοποίησή του λογισμικού πραγματοποιήθηκε από δύο διαφορετικές δράσεις (3.1 και 3.2).

Αντικείμενο της συγκεκριμένης δράσης αποτελεί η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλής φυσικής σε σύγχρονες παράλληλες αρχιτεκτονικές.

Αρχικά η υλοποίηση έλαβε χώρα σε επίπεδο συστοιχιών υπολογιστών (Clusters). Η υλοποίηση των μεθόδων αφορά τόσο σε ομοιογενή, συμμετρικά σχήματα όπου γίνεται χρήση ενός συγκεκριμένου προγραμματιστικού μοντέλου ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI), όσο και σε ετερογενή, μη συμμετρικά σχήματα, όπου ο παραλληλισμός των μεθόδων επιτελείται σε πολλαπλά

επίπεδα. Σύμφωνα με αυτά τα συνεργατικά σχήματα εφαρμόστηκε συνδυασμός μοντέλων ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI) με μοντέλα προγραμματισμού κοινής μνήμης (OpenMP, Pthreads) για την περισσότερο ευέλικτη αξιοποίηση των επεξεργαστών πολλαπλών πυρήνων που περιέχονται σε κάθε κόμβο του Cluster.

Κατά το επόμενο στάδιο της συγκεκριμένης δράσης η υλοποίηση έγινε σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (webservices). Στην περίπτωση αυτή το παρεχόμενο λογισμικό είναι σε θέση να αξιοποιεί με καλύτερο τρόπο τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, ιδιαίτερα κατά την περίπτωση όπου υποβάλλονται μέσω του Cloud αιτήσεις για παράλληλη εκτέλεση από περισσότερους του ενός χρήστες. Για το λόγο αυτό στη δράση 4.1 υλοποιήθηκε το μοντέλο Λογισμικό ως Υπηρεσία (**SaaS** – **S**oftware **a**s **a** **S**ervice), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδικτυακού γραφικού περιβάλλοντος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές.

Συγκεκριμένα, έγιναν οι παρακάτω ενέργειες:

- Μελέτη σχετικής βιβλιογραφίας
- Εγκατάσταση και δοκιμαστική λειτουργία Πλατφόρμας FEniCS.
- Εγκατάσταση Εικονικού Cluster σε OpenStack (Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής – ΤΕΙ Δ. Ελλάδας).
- Παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου MonteCarlo σε Cluster (σε OpenStack).
- Προετοιμασία FeniCS για παράλληλη υλοποίηση των IR Μεθόδων (π.χ. σύνδεση με βιβλιοθήκες, κ.λ.π.).
- Παράλληλη υλοποίηση της IR GEO στη FeniCS (με RabbitMQ), σε περιβάλλον Cloud.
- Παράλληλη υλοποίηση της IR ROB στη FeniCS (με RabbitMQ) , σε περιβάλλον Cloud.
- Σύγχρονη / ασύγχρονη υλοποίηση της IR GEO στη FeniCS (με RabbitMQ) , σε περιβάλλον Cloud.
- Αξιολόγηση των μεθόδων σε benchmark προβλήματα.
- Υλοποίηση Μεθόδων Χαλάρωσης στη Διεπαφή σαν Υπηρεσία (IraaS) , σε περιβάλλον Cloud.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:
  1. *A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, P. Alefragis, S. Likothnassis*, “Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO”, Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.
  2. *P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, “Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains*

Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

3. Aigli Korfiati, Niki Sfika, Konstantis Daloukas, Christos Alexakos, Panagiota Tsompanopoulou and Spiros Likothanassis, *IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs*, 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC'15), Proc World Congress on Engineering, Vol. I, 541-546, 2015 (Certificate of Merit).

Σχετική εργασία που αναφέρεται σε άλλη δράση είναι και η:

- *A. Korfiati, K. Daloukas, P. Alefragis, P. Tsompanopoulou and S. Likothanassis,* "An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain / Multi-Physics Problems", International Conference on Numerical Analysis Applications and Methods (ICNAAM), Rhodes, Greece, Sept. 23-29, 2015.

➢ Το Software παράλληλης υλοποίησης των αλγορίθμων.

Συνολικά, η ΚΕΟ3 σε συνεργασία με τις άλλες 2 ΚΕΟ, έχει ολοκληρώσει τα παρακάτω παραδοτέα:

1. 3 Ετήσιες Τεχνικές Εκθέσεις και την Τελική Έκθεση Προόδου
2. Τα παραπάνω 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων σχετικά με το αντικείμενο του έργου.
3. Στα πλαίσια του έργου ολοκληρώθηκε μια μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία, από την εξωτερική συνεργάτιδα κα Αίγλη Κορφιάτη, μεταπτυχιακής φοιτήτριας στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα ειδίκευσης "Επιστήμη και τεχνολογία Υπολογιστών", του Τμήματος Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών. Η επίβλεψη της Μ.Δ.Ε. έγινε από τον Επιστημονικό Υπεύθυνο της ΚΕΟ3 καθηγητή Σ. Λυκοθανάση. Το θέμα της εργασίας είναι:
   «Σχεδιασμός και υλοποίηση προηγμένων μαθηματικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές».
4. Είναι υπό συγγραφή 1 επιστημονικό άρθρο για υποβολή σε επιστημονικό περιοδικό. Θα αφορά την παραλληλοποίηση των 2 μεθόδων της Interface Relaxation (GEO, ROB) στην Πλατφόρμα FEniCS.
5. Ο κώδικας των παράλληλων υλοποιήσεων των μεθόδων InterfaceRelaxation (GEO, ROB) και MonteCarlo.

Κατά τη διάρκεια του έργου η ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Πατρών ΚΕΟ 3, ανέπτυξε συνεργασίες:

➢ Με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ΚΕΟ 2, σε θέματα υλοποίησης της μεθόδου Interface Relaxation στην πλατφόρμα FEniCS (με την Αν. Καθηγήτρια Γ. Τσομπανοπούλου). Συγκεκριμένα, υλοποιήθηκαν

παράλληλα οι μέθοδοι IR – GEO και η IR – ROB στην Πλατφόρμα FEniCS. Επίσης, εκτός από τη σύγχρονη, έγινε και ασύγχρονη υλοποίηση της μεθόδου IR – GEO, στη FEniCS. Τέλος έγινε παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου Monte Carlo σε p-Threads (με τον Καθηγητή Μ. Βάβαλη και τον υποψήφιο διδάκτορα Μ. Μαρούδα), σε Cluster (σε OpenStack).

- Με όλα τα μέλη της ΚΕΟ 1, σε θέματα παράλληλης υλοποίησης της μεθόδου ALOPEX, για την επίλυση του προβλήματος Περιβαλλοντικής Μηχανικής. Παραλληλοποιήθηκε από την ΚΕΟ3 η μέθοδος Alopex στην εφαρμογή της για το πρόβλημα της υφαλμύρινσης υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης στα πηγάδια στο Βαθύ της Καλύμνου που έχει υλοποιηθεί από την ΚΕΟ 1, στη FEniCS.

Επισημαίνουμε ότι βρίσκεται σε εξέλιξη η διδακτορική διατριβή της εξωτερικής συνεργάτιδας κας Αίγλης Κορφιάτη η οποία πραγματεύεται θέματα που είναι απολύτως σχετικά με την ερευνητική δραστηριότητα του έργου. Η διατριβή βρίσκεται στο 2^{ο} έτος, υπό την επίβλεψη του Επιστημονικού Υπεύθυνου της ΚΕΟ 3 καθηγητή Σ. Λυκοθανάση και έχει θέμα:

«Σχεδιασμός και υλοποίηση ολοκληρωμένου περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων σε αρχιτεκτονικές υψηλής επίδοσης και εφαρμογές**»**

Η εξέλιξη της διατριβής είναι ένας ακόμη επιπρόσθετος λόγος για τον οποίο η ΚΕΟ3 θα συνεχίσει την συνεργασία της με της άλλες δύο ΚΕΟ, παρόλο που το έργο ολοκληρώθηκε.

1.7 Δράση 3.2: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES)

Η Δράσης 3.2 αφορά στην αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε αρχιτεκτονικές επεξεργασίας γραφικών (Graphics Processor Units, GPU) καθώς και σε επαναδιατασσόμενες (reconfigurable) αρχιτεκτονικές (πχ. Field Programmable Gate Arrays, FPGAs).

Με βάση τα αποτελέσματα της μελέτης μεταφέρθηκαν και απεικονίστηκαν τα πακέτα λογισμικού – είτε καθολικά, είτε κατά τμήματα - στα κατάλληλα κατά περίπτωση πολυπύρηνα συστήματα. Επίσης κατασκευάστηκε εξειδικευμένο υλικό για την επιτάχυνση συγκεκριμένων υπολογιστικών πυρήνων των εφαρμογών και το απαραίτητο λογισμικό για την επικοινωνία με τον υπολογιστή (Host computer).

Για την υλοποίηση σε FPGA, χρησιμοποιήθηκε λογισμικό CAD που αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας. Το λογισμικό αυτό μετατρέπει εφαρμογές που έχουν αναπτυχθεί σε OpenCL σε επιταχυντές υλικού (hardware accelerators). Επιταχύνθηκε έτσι η ανάπτυξη ενός συστήματος FPGA χωρίς να χρειάζονται γνώσεις της αρχιτεκτονικής του συστήματος.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι οι αρχιτεκτονικές GPU και FPGA είναι πολύ πιο αποδοτικές όσον αφορά τον χρόνο εκτέλεσης αλλά και την κατανάλωση ισχύος σε σχέση με τις συμβατικές CPUs. Χρησιμοποιώντας διατάξεις επαναδιατασσόμενης λογικής (FPGAs) ένας σχεδιαστής τέτοιων συστημάτων μπορεί να υλοποιήσει μια σειρά από αρχιτεκτονικές που καλύπτουν μεγάλη γκάμα απόδοσης, κόστους και κατανάλωσης ισχύος. Αυτό το συμπέρασμα χρησιμοποιήθηκε για την δημιουργία ενός ετερογενούς συστήματος που αποτελείται από συμβατικές CPUs οι οποίες μεταφέρουν τμήματα του υπολογισμού με υψηλές υπολογιστικές απαιτήσεις σε επιταχυντές GPU και FPGAs.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:

1. K. Krommydas, W. Feng, M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *On the Characterization of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Platforms*, 25th IEEE Systems, Archit. & Processors, IEEE Xplore Proc ASAP, pp 153-160, 2014 (Best Paper Candidate)
2. M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *A grammar induction method for clustering of operations in complex FPGA's designs*, IEEE 22nd Int. Symp. F.-Prog. Cust. Mac., IEEE Xplore Proc FCCM, pp 194-201, 2014
3. K. Krommydas, W. Feng, CD Antonopoulos, N. Bellas, *OpenDwarfs: Characterization of Dwarf-Based Benchmarks on Fixed and Reconfigurable Architectures*, J Sign Process Syst, 2015 (Αποδεκτό για δημοσίευση)

Έχει επίσης υποβληθεί προς δημοσίευση το άρθρο:

- P. Skribonis, G. Zindros, I. Parnassos, M. Owaida, N. Bellas, P. Ienne, *Exploring Automatically Generated Platforms in High Performance FPGAs*, ParaFPGA 2015, Proceedings Advances in Parallel Computing.

- Το λογισμικό του σχεδιασμού των επιταχυντών υλικού (hardwareaccelerators) σε γλώσσα Verilog καθώς και το λογισμικό OpenCL για υλοποίηση σε GPU.

Κύρια ερευνητική ομάδα της Δράσης αυτής είναι ΚΕΟ 2 του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας. Οι συνεργασίες που έλαβαν χώρα στα πλαίσια της Δράσης 3.2 ήταν οι εξής:

- Εσωτερικές συνεργασίες με τις άλλες ομάδες, κυρίως με μέλη της ομάδας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.
- Εξωτερικές συνεργασίες με δύο πανεπιστήμια του εξωτερικού: με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Paololenne στο École polytechnique

fédérale de Lausanne (EPFL) στην Λωζάννη της Ελβετίας. Επίσης με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Wu-chun Feng στο Virginia Tech στις ΗΠΑ.

1.8 Δράση 4.1: ΣΥΓΚΕΡΑΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ

Η Δράση 4.1 αφορά στον συγκερασμό των ερευνητικών δραστηριοτήτων στα πλαίσια των υπολοίπων δράσεων του έργου με στόχο την σχεδίαση και την ανάπτυξη περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων το οποίο θα είναι κατάλληλο για τις εφαρμογές ενδιαφέροντος του έργου (Multi-Domain / Multi-Physics) και ταυτόχρονα θα είναι ικανό να αξιοποιήσει σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές (multicore CPUs, GPUs, FPGAs, γρήγορα μέσα αποθήκευσης, υποδομή Cloud).

Πιο συγκεκριμένα, οι σημαντικότεροι στόχοι της δράσης είναι οι ακόλουθοι:

1. Επιλογή βασικού περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων.

2. Επέκταση του περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου.

3. Επέκταση του περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων για την αξιοποίηση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ετερογενών συστημάτων, υποδομής cloud, αλλά και σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage).

Για την επιλογή βασικού περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων η ερευνητική ομάδα επέλεξε το πακέτο FEniCS το οποίο αποτελεί μια συλλογή ελεύθερων εργαλείων λογισμικού εξειδικευμένων στην αυτόματη και αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων.

Αναφορικά με την επέκταση του περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου, ο βασικός στόχος των επεκτάσεών της ερευνητικής ομάδας ήταν η σχεδίαση και η υλοποίηση ενός περιβάλλοντος μετα-υπολογισμού το οποίο υποστηρίζει προβλήματα Multi-Domain / Multi-Physics, χωρίς να απαιτούνται αλλαγές στα χαμηλά επίπεδα του FEniCS (δημιουργία συστημάτων, γραμμική επίλυση συστημάτων κλπ). Οι επεκτάσεις αυτές είναι διαθέσιμες στον προγραμματιστή του FEniCS με απόλυτα ”φυσικό” τρόπο.

Στα πλαίσια της υποστήριξης προβλημάτων Multi-Domain / Multi-Physics υλοποιήθηκαν οι ακόλουθες μέθοδοι χαλάρωσης στις διεπαφές:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Μέθοδος Schwarz για προβλήματα με επικαλυπτόμενα υποχωρία.
- Στοχαστική μέθοδος εκτίμησης των τιμών στις διεπαφές.
- Μέθοδος Geometric Contraction (GEO).
- Μέθοδος ROB.

Αναφορικά με τον τρίτο κύριο στόχο της εν λόγω δράσης υλοποιήθηκαν διάφορες επεκτάσεις στο FEniCS για την αξιοποίηση επιλυτών υλοποιημένων σε επιταχυντές, επιλυτών που αξιοποιούν μέσα αποθήκευσης flash, καθώς και για την υποστήριξη επιλυτών εξειδικευμένων σε συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων. Επίσης, πραγματοποιήθηκε μελέτη της αλληλεπίδρασης δημοφιλών πακέτων επιλυτών (in-core και out-of-core) για συστήματα γραμμικών εξισώσεων με αραιούς πίνακες, με αρχιτεκτονικές multicore CPUs, GPUs, καθώς και με συστήματα που ενσωματώνουν γρήγορα μέσα αποθήκευσης (flash storage). Ακολούθως, σχεδιάστηκαν και αναπτύχθηκαν βελτιώσεις στο υποσύστημα γρήγορης αποθήκευσης ώστε να είναι περισσότερο αποδοτικό για τις αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιούνται στα πλαίσια του έργου. Το περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων επεκτάθηκε ώστε να μπορεί να αξιοποιήσει υπηρεσίες που προσφέρονται στο cloud, όπως επίσης και να προσφέρει – με τη σειρά του – υπηρεσίες στο cloud. Η διασύνδεση βασίζεται σε δημοφιλή πρότυπα (SOAP, WSDL, ebXML). Τέλος, σχεδιάστηκε και υλοποιήθηκε προσαρμοσμένη αρχιτεκτονική cloud για την επίλυση προβλημάτων Multi-Domain / Multi-Physics που υλοποιεί μεθοδολογίες χαλάρωσης στη διεπαφή (Interface Relaxation as a Service – IRaaS).

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής τα οποία είναι σε συμφωνία και με το τεχνικό δελτίο του έργου, και τα οποία είναι τα ακόλουθα:

- Τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων.

- Πρότυπο λογισμικό για Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων το οποίο περιλαμβάνει τα ακόλουθα επιμέρους στοιχεία:

  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη προβλημάτων MDMP (μέθοδοι Schwarz, υβριδική αιτιοκρατική/στοχαστική, GEO, ROB).

  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη εναλλακτικών αρχιτεκτονικών (επέκταση Whale).

  - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση cloud με χρήση web services.

- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση προσαρμοσμένων (custom) μηχανισμών cloud.

- Η προσαρμοσμένη (custom) πλατφόρμα cloud IRaaS.

➢ Επιπλέον των παραδοτέων που προέβλεπε το τεχνικό δελτίο, στα πλαίσια της δράσης αυτής παρήχθησαν και οι ακόλουθες 5 δημοσιεύσεις:

1. Athanasios Fevgas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, ”Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage”, 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), 02-05 Sep 2014, Chania, Crete, Greece.
2. V. Vasileiadis, CD Antonopoulos, G. Zindros, *Automating data management in heterogeneous systems using polyhedral analysis*, PCI 2015, ICPS ACM Proc, pp 317-322, 2015
3. Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, ”Efficient Solution of Large Sparse Linear Systems in Modern Hardware”, 6th International Conference on Information, Intelligence, Systems and Applications (IISA2015), 06-08 July 2015, Corfu, Greece.
4. Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas and Panagiota Tsompanopoulou, ”Dynamic Cloud Resources Allocation on Multidomain/Multiphysics Problems”, The 3rd International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud 2015), 24-26 August 2015, Rome, Italy.
5. Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, ”On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems”, Journal of Mathematics and Statistical Science. Accepted 10/2015, in press.

1.9 Δράση 4.2: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ

Ο κύριος στόχος της Δράσης 4.2 ήταν η επικύρωση των αποτελεσμάτων της ερευνητικής ομάδας αναφορικά με την αποδοτικότητα μεθόδων στο πρόβλημα της εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων καθώς και η μελέτη της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, με χρήση νέων μεθόδων, λογισμικού και σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών.

Για την εν λόγω δράση η ερευνητική ομάδα χρησιμοποίησε γραμμικά και μη-γραμμικά μαθηματικά μοντέλα ώστε να περιγράψει το πρόβλημα εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων, τα οποία λαμβάνουν υπόψη την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού αλλά και προσομοιώνουν την επίδραση διάφορων πρωτοκόλλων ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας, με κεντρικό

στόχο την επικύρωση των αριθμητικών και αναλυτικών μεθόδων καθώς και του λογισμικού που ανέπτυξαν στα πλαίσια του έργου.

Για το σκοπό αυτό η ερευνητική ομάδα:

- Χρησιμοποίησε την γενικευμένη μη-γραμμική εξίσωση του Fisher, η οποία περιγράφει γενικά το πρόβλημα της βιολογικής εισβολής/μετακίνησης πληθυσμών και διαθέτει αναλυτική λύση, ώστε να επικυρωθεί η τάξη σύγκλισης της Hermite Collocation μεθόδου με Hadamard γινόμενα καθώς επίσης και να μελετηθεί η συμπεριφορά της όταν συνδυάζεται με Strong Stability Preserving Runge-Kutta (SSPRK) σχήματα διακριτοποίησης χρόνου.
- Μελέτησε και επικύρωσε τη συμπεριφορά της νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου σε γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων στις μία και δύο χωρικές διαστάσεις σε ορθογώνια χωρία.
- Μελέτησε και επικύρωσε τη συμπεριφορά της αναλυτικής μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά σε γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων.
- Επικύρωσε τη συμπεριφορά της υβριδικής Collocation μεθόδου με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ) σε γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.
- Εφάρμοσε τεχνικές επανέναρξης της διαδικασίας στο χρόνο για να μελετηθεί η συμπεριφορά των μεθόδων Collocation και μετασχηματισμού Φωκά στην αντιμετώπιση εξελικτικών μοντέλων εφοδιασμένων με πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας/χημειοθεραπείας.
- Μελέτησε την απεικόνιση, σε CPU/GPU αρχιτεκτονικές, και επιτάχυνση των υπολογισμών που απαιτούνται για την επίλυση των εξισώσεων της ασυνεχούς Tensor Product Hermite Collocation μεθόδου, σε συνδυασμό με σχήματα SSPRK, για δισδιάστατα μοντέλα εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων.

Παράλληλα, σε συνεργασία με ιατρική ομάδα του Ναυτικού Νοσοκομείου Χανίων, η ερευνητική ομάδα προχώρησε στην ψηφιακή επεξεργασία απεικονίσεων Magnetic Resonance Imaging (MRI) του εγκεφάλου και στην ανάπτυξη αλγορίθμων για την οριοθέτηση των περιοχών με διαφορετικό συντελεστή διάχυσης (δηλ. Φαιά και Λευκή ουσία). Εν συνεχεία, κάνοντας χρήση εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού, επετεύχθη η κατάλληλη διακριτοποίηση των χωρίων καθώς και η απαιτούμενη κωδικοποίηση της πληροφορίας αυτής προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Με τον τρόπο αυτό κατέστη δυνατή η μελέτη κατ' αρχήν γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε πραγματική γεωμετρία πεδίου με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής τα οποία είναι σε

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

συμφωνία και με το τεχνικό δελτίο του έργου, και τα οποία είναι τα ακόλουθα:

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Έχουν δημοσιευτεί τα παρακάτω τρία (3) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές (εκ των οποίων ένα έχει λάβει βραβείο καλύτερης δημοσίευσης):
  1. IE Athanasakis , EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation,* 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012133.
  2. AG Sifalakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *The Unified Transform for a Reaction-Diffusion Brain Tumor Model that Incorporates Tissue Heterogeneity and Radiotherapy,* Proc of INASE-PMAMCM 2015 Recent Advances in Mathematics, pp 137-142, 2015
  3. IE Athanasakis, ND Vilanakis and EN Mathioudakis, *Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs,* Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

  Επίσης έχει υποβληθεί ένα (1) άρθρο για δημοσίευση σε διεθνές επιστημονικό περιοδικό με τίτλο: *«The Fokas Method For Heterogeneous Reaction-Diffusion Brain Tumor Models That Incorporate Radiotherapy And Chemotherapy» (*by AG Sifalakis, MG Papadomanolaki, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis).

1.10 Δράση 4.3: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Ο κύριος στόχος της Δράσης 4.3 ήταν η επικύρωση των αποτελεσμάτων της ερευνητικής ομάδας αναφορικά με την αποδοτικότητα μεθόδων και λογισμικού στο πρόβλημα της υφαλμύρινσης (διείσδυση θαλασσινού ύδατος) υπόγειων υδροφορέων γλυκών υδάτων καθώς επίσης και η ανάπτυξη λογισμικού για τη μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα με υψηλής ακρίβειας μεθόδους αλλά και αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

Για την εν λόγω δράση η ερευνητική ομάδα μελέτησε το πρόβλημα της

διείσδυσης θαλασσινού ύδατος σε παράκτιους υπόγειους υδροφορείς γλυκού νερού, χρησιμοποίησε το προσεγγιστικό μοντέλο του Strack το οποίο βασίζεται στις παραδοχές αφενός μεν ύπαρξης *απότομης σφήνας (sharp interface)* και συνεπώς ανυπαρξία ζώνης υφάλμυρου νερού (*transition zone*) μεταξύ του γλυκού και αλμυρού ύδατος, και αφετέρου της εξίσωσης Ghyben-Herzberg η οποία σε συνθήκες σταθερής κατάστασης (steady state) προσεγγίζει τη θέση της σφήνας. Η βασική ΜΔΕ του μοντέλου που περιγράφει το δυναμικό ροής ανήκει στην κατηγορία των ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων αφού ο συντελεστής διάχυσης, ο οποίος χαρακτηρίζει την υδραυλική αγωγιμότητα, είναι ασυνεχής λόγω γεωλογικής ανομοιογένειας του εδάφους.

Επίσης κεντρικός στόχος της ερευνητικής ομάδας για την εν λόγω δράση αναδείχθηκε η ανάπτυξη και μελέτη ενός συστήματος βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα μέσω στοχαστικών αλγορίθμων βελτιστοποίησης.

Για το σκοπό αυτό η ερευνητική ομάδα:

- Κατασκεύασε και μελέτησε τη σύγκλιση μίας νέας έκδοσης του ευέλικτου στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης Algorithm of Pattern Extraction (ALOPEX).
  - Κατασκεύασε ένα σύστημα «επιδιόρθωσης» του αλγορίθμου για την εφαρμογή των περιοριστικών συνθηκών (constraints) του προβλήματος καθώς και ένα αποτελεσματικό κριτήριο τερματισμού του αλγορίθμου.
  - Μελέτησε τη συμπεριφορά του νέου αλγορίθμου καθώς και την ευστάθεια των λύσεων που παράγει σε ένα αναλυτικό μοντέλο εισβολής θαλάσσιου ύδατος σε ομογενείς ορθογώνιους παράκτιους υπόγειους υδροφορείς.

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης εφαρμόστηκε με επιτυχία, στη συνέχεια, σε συνδυασμό με το εξειδικευμένο λογισμικό PTC (Princeton Transport Code), ένα προσομοιωτή ροής και μεταφοράς μάζας στις τρεις (3) διαστάσεις, για να μελετηθεί το πρόβλημα πεδίου του έργου το οποίο αναφέρεται στον υπόγειο υδροφορέα της Χερσονήσου (Ηράκλειο Κρήτης). Η ευελιξία του αλγορίθμου και η ταχεία σύγκλισή του επέτρεψε την αποτελεσματική μελέτη του προβλήματος και παραγωγή νέων λύσεων για την αντιμετώπιση του προβλήματος υφαλμύρινσης του υδροφορέα της Χερσονήσου.

Παράλληλα, ο αλγόριθμος στη νέα μορφή του κωδικοποιήθηκε σε γλώσσα python, ώστε να καταστεί δυνατή η χρησιμοποίησή του από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Επίσης η ερευνητική ομάδα προχώρησε και στην ψηφιακή επεξεργασία του υδροφορέα της Χερσονήσου και στην οριοθέτηση των περιοχών με διαφορετική υδραυλική αγωγιμότητα καθώς και στην κατάλληλη διακριτοποίηση των χωρίων προς χρήση από την πλατφόρμα FEniCS. Το μοντέλο, εφοδιασμένο με τεχνικές εντοπισμού του μετώπου

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

υφαλμύρινσης, είναι διαθέσιμο.

Επίσης, ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης χρησιμοποιήθηκε για την επικύρωση των αποτελέσματων του έργου και την περαιτέρω μελέτη των μεθόδων που αναπτύχτηκε σε προβλήματα υφαλμύρινσης υδροφορέων. Πιο συγκεκριμένα, η ερευνητική ομάδα χρησιμοποίησε ένα μοντέλο ορθογώνιου υδροφορέα ανομοιογενούς υδραυλικής αγωγιμότητας που προσομοιώνει το υδροφορέα στο Βαθύ της Καλύμνου, για να μελετήσει τη συμπεριφορά της ασυνεχούς μεθόδου Collocation αλλά και των Μεθόδων Χαλάρωσης στις Διεπαφές καθώς και υβριδικών μεθόδων τύπου Schwarz που αποτελούν μέρος της επέκτασης της πλατφόρμας FEniCS που αναπτύχτηκε από την ομάδα του έργου στα πλαίσια της δράσης 4.1.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής τα οποία είναι σε συμφωνία και με το τεχνικό δελτίο του έργου, και τα οποία είναι τα ακόλουθα:

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Έχουν δημοσιευτεί τα παρακάτω τέσσερα (4) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές:

1. PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete,* Proc. of INASE-WHH 2015 Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, pp 329-334, 2015.
2. IE Athanasakis, ZA Dokou, EN Mathioudakis, PN Stratis and ND Vilanakis, *Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer,* J Math. Mod. Methods in Applied Sciences, 9, pp. 727-732, 2015
3. PN Stratis, YG Saridakis, MS Zakynthinaki and EP Papadopoulou, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers,* 2nd Intern. Conf. on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012112

Επίσης έχουν υποβληθεί δύο (2) άρθρα για δημοσίευση σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά:

I. PN Stratis, GP Karatzas, EP Papadopoulou, MS Zakynthinaki and YG.Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers,* PLOSone (Revised version Submitted 2015)

II. PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou, and YG.Saridakis *PTC Simulations, Stochastic Optimization and Safety Strategies for Groundwater Pumping Management: Case Study of the Hersonissos Coastal Aquifer in Crete,* Applied Water Science (submitted 2015)

1.11 Δράση 6: ΔΙΑΧΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Η Δράση 6 αφορά στις ενέργειες για τη διάχυση των αποτελεσμάτων του έργου.

Όπως προβλέπεται και στο τεχνικό δελτίο, η δημοσιοποίηση των αποτελεσμάτων πραγματοποιήθηκε με τη δημιουργία σχετικής ιστοσελίδας και με την οργάνωση επιστημονικής ημερίδας, καθώς επίσης με παρουσιάσεις και δημοσιεύσεις σε διεθνή συνέδρια και επιστημονικά περιοδικά αλλά και με τη διοργάνωση επιστημονικών ημερίδων.

Απολογιστικά, οι κύριες δραστηριότητες για την διάχυση των αποτελεσμάτων που αναπτύχθηκαν κατά τη διάρκεια του έργου περιλαμβάνουν:

I. Παρουσιάσεις/Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά Συνέδρια με Σύστημα Κριτών

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ	
Αριθμός	**20**
Ομιλίες	**43**
Δημοσιεύσεις	**24***
Poster	**2**
ΔΙΑΚΡΙΣΕΙΣ	
Βραβείο Καλλίτερης Εργασίας	**3**
Βραβείο Καλλίτερης Εργασίας Νέου Ερευνητή	**1**
Certificate of Merit	**1**
Υποψηφιότητα Καλλίτερης Εργασίας	**1**

II. Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά με Σύστημα Κριτών

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ	
Δημοσιευμένα & Υπό-Δημοσίευση Άρθρα	**10***
Υπό-Κρίση Άρθρα	**3**

*Σημειώνουμε ότι έχει υπερκαλυφθεί ο στόχος του έργου για 18 δημοσιεύσεις σε επιστημονικά περιοδικά ή/και πρακτικά διεθνών συνεδρίων.

III. Διοργάνωση Επιστημονικών Ημερίδων/Σεμιναρίων (Workshops)

Διοργανώθηκαν 2 επιστημονικά workshops στα πλαίσια του διεθνούς συνεδρίου *NumAn 2014 – 6th International Conference in Numerical Analysis* με τίτλο:

- ***Workshop on Fokas Method*** (10 Presentations)
- ***Workshop on Multi-Physics, Multi-Domain Problems*** (10 Presentations)

Τα workshops αυτά τα παρακολουθήσαμε και οι δυο αξιολογητές Μ. Βραχάτης και Δ. Νούτσος ως μέλη του παραπάνω Επιστημονικού Συνεδρίου. Οι εντυπώσεις μας ήταν πάρα πολύ καλές. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον η συμμετοχή πολλών νέων ερευνητών με καταπληκτικές παρουσιάσεις.

IV. Ιστοσελίδα του έργου

Η τελική μορφή της ιστοσελίδας ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε στα μέσα του προγράμματος και ενημερωνόταν τακτικά έως και τη λήξη του από συνεργαζόμενο μέλος της 1ης ερευνητικής ομάδας, ολοκληρώνοντας το σχετικό παραδοτέο της δράσης. Περιλαμβάνει πλήρη στοιχεία για τους στόχους του προγράμματος, τις πηγές χρηματοδότησης, τους συνεργαζόμενους εταίρους, τις δημοσιεύσεις, τα ερευνητικά αποτελέσματα κ.λ.π. Η ιστοσελίδα του έργου λειτουργεί στην ηλεκτρονική διεύθυνση

http://www.tuc.gr/index.php?id=5209

V. Διοργάνωση Ημερίδας Παρουσίασης των αποτελεσμάτων

Διοργανώθηκε η προβλεπόμενη στο έργο Ημερίδα Παρουσίασης των Αποτελεσμάτων (ΗΠΑ) του έργου στις 14 Νοεμβρίου 2015 στο Πολυτεχνείο Κρήτης. Παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα όλων των δράσεων με:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- 10 Παρουσιάσεις-Ομιλίες
- 9 Posters

Τα πρακτικά (οι παρουσιάσεις και τα posters) σε ηλεκτρονική μορφή έχουν αναρτηθεί στην ιστοσελίδα του έργου ολοκληρώνοντας τα σχετικά παραδοτέα του έργου. Στην ημερίδα, την οποία παρακολουθήσαμε και οι δύο αξιολογητές του έργου και ήταν ανοικτή στο κοινό, παραβρέθηκαν όλα τα μέλη των τριών κεντρικών ερευνητικών ομάδων που ανέλυσαν (μέσω των παρουσιάσεων και των posters) το επιστημονικό αντικείμενο και τα αποτελέσματα των δράσεων. Το επίπεδο των παρουσιάσεων ήταν επιστημονικά και τεχνικά υψηλό και ταυτόχρονα κατανοητό και κατατοπιστικό. Έγιναν εκτενείς συζητήσεις μεταξύ των μελών και των αξιολογητών. Ήταν εντυπωσιακός ο τρόπος παρουσίασης των αποτελεσμάτων που παρήχθησαν καθώς και των μεθόδων και τεχνικών που αναπτύχθηκαν στα προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής, όπως η υφαλμύρινση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης και η διάδοση πρωτογενών καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Έγινε καθαρό ότι η επιστημονική έρευνα είχε ως αφετηρία υπαρκτά προβλήματα, όπως τα παραπάνω. Ακολούθησαν οι αριθμητικές τεχνικές για την προσέγγιση του μοντέλου που διέπει το πρόβλημα και τέλος οι αριθμητικές μέθοδοι συνδυάστηκαν με την ανάπτυξη υπολογιστικών τεχνικών, κυρίως παράλληλων, για την υλοποίησή των. Μέσα από τις παρουσιάσεις, τα posters και τις συζητήσεις φάνηκαν τα εξής:

- Στο υποέργο έγινε έρευνα υψηλού επιπέδου που χαρακτηρίζεται έντονα από τη διεπιστημονικότητα. Συνδυάστηκαν επιστημονικές περιοχές κυρίως της αριθμητικής επίλυσης προβλημάτων αρχικών ή συνοριακών τιμών ΜΔΕ με σύγχρονες τεχνικές υλοποίησης από την επιστήμη των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών.
- Η έρευνα χαρακτηρίζεται επίσης διαπανεπιστημιακή. Φάνηκε ότι έγινε πολύ καλή όσμωση των τριών ερευνητικών ομάδων: Πολυτεχνείο Κρήτης – Πανεπιστημίου Θεσσαλίας – Πανεπιστημίου Πατρών, καθώς και του μετακαλούμενου ερευνητή από το εξωτερικό, Α. Φωκά, με αποτέλεσμα να παραχθούν σημαντικά αποτελέσματα.
- Από το έργο ωφελήθηκαν πολύ νέοι ερευνητές: μεταπτυχιακοί φοιτητές, υποψήφιοι διδάκτορες, νέοι διδάκτορες.
- Άνοιξαν νέα πεδία επιστημονικής έρευνας για το μέλλον.

Συνέντευξη των Μελών των Ερευνητικών Ομάδων από τους Αξιολογητές

Την Κυριακή 15-11-2015 έγινε, στο Πολυτεχνείο Κρήτης, συνέντευξη – συζήτηση μεταξύ των μελών των ερευνητικών ομάδων και των δυο αξιολογητών. Εκεί φάνηκαν ακόμη περισσότερο:

- Η διεπιστημονικότητα της έρευνας,
- Η διαπανεπιστημιακότητα της έρευνας,

- Το δέσιμο των τριών ερευνητικών ομάδων,
- Τα νέα επιστημονικά προβλήματα και οι προοπτικές για μελλοντική έρευνα,
- Η όρεξη των νέων επιστημόνων να συνεχίσουν την έρευνα στα πεδία που ανοίχτηκαν, αλλά και η αγωνία τους για το αν θα βρεθούν ευκαιρίες απασχόλησης για αυτούς, σαν αυτή του Προγράμματος ΘΑΛΗΣ.

2 ΣΥΝΟΨΗ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Συνοψίζοντας, στα πλαίσια αυτού του υποέργου ΘΑΛΗΣ, εκπονήθηκε επιστημονική έρευνα υψηλού επιπέδου η οποία δημοσιεύτηκε σε πρακτικά διεθνών επιστημονικών συνεδρίων, και σε υψηλού επιπέδου επιστημονικά περιοδικά. Τα επιτεύγματα αυτής της έρευνας χαρακτηρίζονται από τα παρακάτω:

1. **Την ενίσχυση της Αριστείας.**
   Η ενίσχυση της αριστείας τεκμηριώνεται από τα παρακάτω:
   - Εκπονήθηκε έρευνα υψηλού επιπέδου από την οποία προέκυψαν 26 δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων, 7 δημοσιεύσεις ή υπό δημοσίευση σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά υψηλού κύρους και 4 εργασίες βρίσκονται υπό κρίση. Έχουν απονεμηθεί 3 βραβεία καλλίτερης εργασίας, 1 βραβείο καλλίτερης εργασίας νέου ερευνητή και 1 Certificate of Merit.
   - Προτάθηκαν λύσεις σε σύγχρονα επιστημονικά προβλήματα Περιβαλλοντικής Φυσικής και Ιατρικής, τα οποία μοντελοποιούνται σε προβλήματα αρχικών ή συνοριακών τιμών ΜΔΕ σε ανομοιογενή χωρία, με φυσικές ασυνέχειες και ασυνέχειες στις διεπαφές των υποχωρίων. Στη συνέχεια αναπτύχθηκαν αριθμητικές μέθοδοι και αριθμητικές τεχνικές που αντιμετωπίζουν αποτελεσματικά τις ασυνέχειες και είναι κατάλληλες για την υλοποίηση σε παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα. Τέλος, υλοποιήθηκαν αντίστοιχοι αλγόριθμοι, σε διάφορες υπολογιστικές πλατφόρμες (CPUs, GPUs, FEniCS) και παραδόθηκαν, έτοιμα προς χρήση, λογισμικά.
   - Εφαρμόστηκε η καινοτόμος μαθηματική μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές και αναπτύχθηκαν λύσεις κλειστής μορφής ως προς τον χρόνο σε ευαίσθητα προβλήματα, όπως εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Σημαντικό ρόλο έπαιξε η συμμετοχή του κορυφαίου

επιστήμονα Καθηγητή Αθανασίου Φωκά ως μετακαλούμενου ερευνητή του εξωτερικού.

2. **Την ανάπτυξη της διεπιστημονικής έρευνας.**
   Η έρευνα χαρακτηρίζεται ως διεπιστημονική αφού έχει αφετηρία υπαρκτά προβλήματα Περιβαλλοντολογικής Μηχανικής και Ιατρικής, αναπτύχθηκαν επιστημονικές περιοχές κυρίως της αριθμητικής επίλυσης προβλημάτων αρχικών ή συνοριακών τιμών ΜΔΕ που περιγράφουν τα προβλήματα αυτά και στη συνέχεια αναπτύχθηκαν σύγχρονες τεχνικές υλοποίησης από την Επιστήμη των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών. Συμμετείχαν ερευνητές του επιστημονικών πεδίων των Εφαρμοσμένων Μαθηματικών, της Αριθμητικής Ανάλυσης και της Επιστήμης Ηλεκτρονικών Υπολογιστών.

3. **Τη συνέργεια μεταξύ ερευνητικών ομάδων διαφορετικών Πανεπιστημίων.**
   Συνεργάστηκαν αρμονικά επιστήμονες τριών ερευνητικών ομάδων από διαφορετικά Πανεπιστήμια, το Πολυτεχνείο Κρήτης, το Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας και το Πανεπιστήμιο Πατρών.
   - Η ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης ασχολήθηκε κυρίως με την επίλυση ΜΔΕ αναπτύσσοντας αριθμητικές μεθόδους, κυρίως μεθόδους Collocation για τη διακριτοποίηση, και με τη μέθοδο μετασχηματισμών Φωκά για την εύρεση λύσεων σε κλειστή μορφή. Συνεργάστηκε επιστημονικά και με τις δυο άλλες ομάδες.
   - Η ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, στο αριθμητικό επίπεδο, εργάστηκε στην ανάπτυξη τεχνικών για τη χαλάρωση στις διεπαφές των υποχωρίων, όπου υπάρχουν ασυνέχειες, καθώς και με την ανάπτυξη στοχαστικών μεθόδων για την αντιμετώπιση προβλημάτων ασυνέχειας και συνεργάστηκε στο επίπεδο αυτό κυρίως με την ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης. Επίσης, συνεργαζόμενη κυρίως με την ομάδα του Πανεπιστημίου Πατρών, εργάστηκε στο επίπεδο υλοποίησης και ανάπτυξης παράλληλων υπολογιστικών τεχνικών και λογισμικού.
   - Η ομάδα του Πανεπιστημίου Πατρών, εργάστηκε κυρίως στο επίπεδο της υλοποίησης των προτεινομένων αριθμητικών μεθόδων και την ανάπτυξη κατάλληλων παράλληλων υπολογιστικών περιβαλλόντων για την αποτελεσματική αντιμετώπιση του προβλήματος.
     Οι συνεργασίες αυτές απέδωσαν άριστα αποτελέσματα.

4. **Την ανάπτυξη συνεργασιών με ιδρύματα και ερευνητικά κέντρα της χώρας και του εξωτερικού.**
   Σημαντικότατη ήταν η συνεργασία με τον Καθηγητή Α. Φωκά του Πανεπιστημίου Cambridge, ως μετακαλούμενου Έλληνα ερευνητή του

προγράμματος ο οποίος συμμετείχε σε όλα τα αποτελέσματα της δράσης 2.4. Καθοριστική επίσης ήταν και η συνεργασία με τον ερευνητικό συνεργάτη Δ. Μαντζαβίνο του Πανεπιστημίου Notre Dame.

Επίσης, στα πλαίσια της Δράσης 3.2, η ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ανέπτυξε συνεργασία με δύο πανεπιστήμια του εξωτερικού: με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Paololenne στο École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) στην Λωζάννη της Ελβετίας και με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Wu-chun Feng στο Virginia Tech στις ΗΠΑ.

Συμπερασματικά, το ερευνητικό αυτό πρόγραμμα πέτυχε στο ακέραιο τους στόχους που έθεσε: Παράχθηκε επιστημονικό έργο υψηλού επιπέδου το οποίο χαρακτηρίζεται από τη διεπιστημονικότητά του. Συνεργάστηκαν ερευνητές από τρία διαφορετικά Ανώτατα Ιδρύματα του εσωτερικού. Αναπτύχθηκαν συνεργασίες με Ιδρύματα του εξωτερικού κυρίως με τον μετακαλούμενο ερευνητή του οποίου ήταν καταλυτική η ενεργή του παρουσία. Ωφελήθηκαν, κυρίως νέοι ερευνητές από όλες τις ερευνητικές ομάδες. Παραδόθηκαν πολύ περισσότερα από τα προβλεπόμενα στην πρόταση παραδοτέα. Τέλος, η επιτελούμενη έρευνα και οι τεχνικές που αναπτύχθηκαν, έδωσαν νέα επιστημονικά θέματα που χρήζουν μελλοντικής έρευνας.

Οι αξιολογητές

Βραχάτης Μιχαήλ
Καθηγητής
Τμήμα Μαθηματικών
Πανεπιστήμιο Πατρών

Νούτσος Δημήτριος
Καθηγητής
Τμήμα Μαθηματικών
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα ΙΑ΄ Τελική Τεχνική Έκθεση Δράσης 6

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015

ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

Δράση 6

Διάχυση Αποτελεσμάτων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

1 Σκοπός **3**
1.1 Ανάπτυξη και υποστήριξη ιστοσελίδας 3
1.2 Ημερίδα παρουσίασης αποτελεσμάτων 3
1.3 Επιστημονικές Ημερίδες 4
1.4 Διεθνή Συνέδρια 7

2 Παραδοτέα **8**
2.1 Ανάπτυξη και υποστήριξη ιστοσελίδας 8
2.2 Πρακτικά ημερίδας σε ηλεκτρονική μορφή 25

3 Συνεργασίες **26**

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Με βάση το τεχνικό δελτίο του έργου οι σημαντικότεροι στόχοι της παρούσας δράσης είναι η διάχυση των αποτελεσμάτων που θα προκύψουν από το προτεινόμενο έργο τόσο στην επιστημονική κοινότητα όσο και στο ευρύ κοινό. Για την επίτευξη των στόχων, αναπτύχθηκε η προβλεπόμενη ιστοσελίδα του έργου ενώ πραγματοποιήθηκε και η επιστημονική ημερίδα δημοσιοποίησης των αποτελεσμάτων.

1.1 Ανάπτυξη και υποστήριξη ιστοσελίδας

Στόχος της ιστοσελίδας είναι η ενημέρωση της επιστημονικής κοινότητας αλλά και του ευρύτερου κοινού για τις δραστηριότητες του έργου και την εξέλιξη του μέσω της τακτικής ανανέωσης του περιεχομένου της καθώς και η παροχή πληροφοριών σχετικών με τις πηγές χρηματοδότησης, τους συνεργαζόμενους εταίρους και την υλικοτεχνική υποδομή τους. Η ιστοσελίδα αναπτύχθηκε μέσω της πλατφόρμας διαχείρισης typo3 του Πολυτεχνείου Κρήτης και αναρτήθηκε στην ηλεκτρονική διεύθυνση

http://www.tuc.gr/index.php?id=5209.

Η πρόσβαση στην ιστοσελίδα είναι δυνατή μέσω της αρχικής ιστοσελίδας του Πολυτεχνείου Κρήτης, πατώντας στο σύνδεσμο ΄Ερευνα' και ακολούθως το σύνδεσμο 'Θαλής', και μέσω της ιστοσελίδας του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Ηλεκτρονικών Υπολογιστών του Πολυτεχνείου Κρήτης ακολουθώντας το σύνδεσμο ΄Ερευνα'. Επιπλέον, η ιστοσελίδα πέραν της έκδοσης στην Ελληνική γλώσσα, είναι διαθέσιμη σε πλήρη μορφή και στην Αγγλική γλώσσα, με ανάλογη της Ελληνικής έκδοσης ανανέωση του περιεχομένου της.

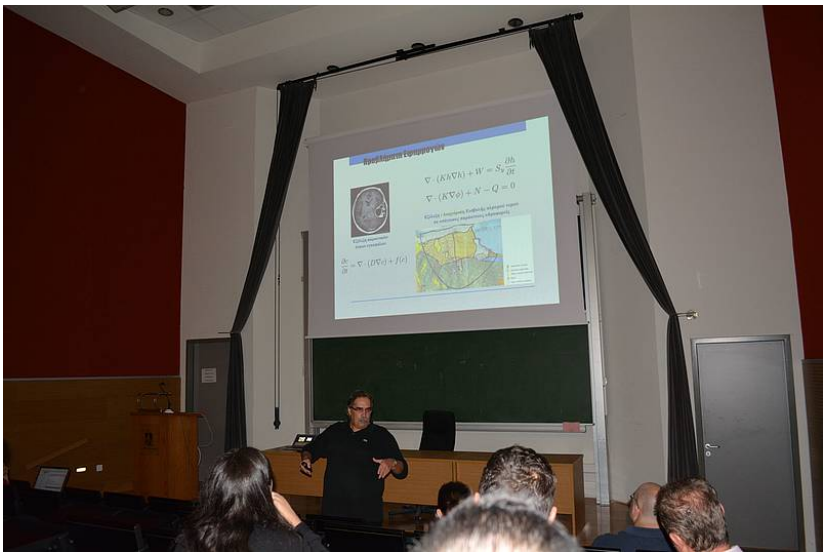
Η ενημέρωση και των δυο εκδόσεων του ιστότοπου πραγματοποιείται τακτικά, τουλάχιστον, σε εβδομαδιαία βάση από το διαχειριστή του. Για τη διαχείριση του, χρησιμοποιείται η πλατφόρμα διαχείρισης typo3 του Πολυτεχνείου Κρήτης.

1.2 Ημερίδα παρουσίασης αποτελεσμάτων

Στα πλαίσια της διάχυσης των αποτελεσμάτων του έργου και όπως προβλέπεται από το ΤΔ, διοργανώθηκε επιστημονική ημερίδα παρουσίασης των αποτελεσμάτων του έργου στο Πολυτεχνείο Κρήτης. Η ημερίδα πραγματοποιήθηκε στις 14 Νοεμβρίου 2015 με τη συμμετοχή μελών των ερευνητικών ομάδων που συμμετείχαν στο έργο και του κοινού. Στα πλαίσια της ημερίδας παρουσιάστηκαν

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

τα αποτελέσματα του έργου.



Σχήμα 1: Παρουσίαση στην Ημερίδα Παρουσίασης Αποτελεσμάτων

1.3 Επιστημονικές Ημερίδες

Στα πλαίσια του Διεθνούς Συνεδρίου Αριθμητικής Ανάλυσης 2014 (NumAn2014) που διεξήχθη στα Χανιά, από 1 ως 5 Σεπτεμβρίου 2014, διοργανώθηκαν επιστημονικές ημερίδες με σκοπό την παρουσίαση της εξέλιξης του έργου. Συγκεκριμένα, κατά τη διάρκεια του συνεδρίου, διοργανώθηκε ημερίδα με θέμα τη Μέθοδο Φωκά (Workshop on Fokas Method) και ημερίδα με θέμα Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων (Workshop on Multiphysics, Multidomain Problems). Κατά τη διάρκεια τους πραγματοποιήθηκαν παρουσιάσεις σχετικές με την εξέλιξη της ερευνητικής τους εργασίας από μέλη των ερευνητικών ομάδων. Αναλυτικά,

Ημερίδα στη Μέθοδο Φωκά

- Numerical Solution of the Unified Transform for Linear Elliptic PDEs in Polygonal Domains, Α.Φωκάς
- Fokas transform method for classes of advection-diffusion IBVPs, Α. Σηφαλάκης

Ημερίδα στα Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων

- Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multi-domains, Σ. Λυκοθανάσης

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, Π. Τσομπανοπούλου
- Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO, Α. Κορφιάτη
- Discontinuous Hermite Collocation and Runge-Kutta schemes for multi-domain linear and non-linear brain tumor invasion models, I. Αθανασάκης
- Solving discontinuous collocation equations for a class of brain tumor models on GPUs, N. Βιλανάκης
- Significance-Based Computing for Reliability and Power Optimization, N. Μπέλλας
- SOpenCL: An Infrastructure for Transparently Integrating FPGAs in Heterogeneous, Accelerator-Based Systems, X. Αντωνόπουλος
- Software Platforms for Multi-Domain Multi-Physics Simulations,M. Μαρούδας
- Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage, A. Φεύγας
- On the Numerical Solution of Power Flow Problems, E. Βάβαλης

Επιπλέον, παρουσιάσεις στην ημερίδα της μεθόδου Φωκά πραγματοποιήθηκαν και από τους παρακάτω συμμετέχοντες στο συνέδριο:

Ημερίδα στη Μέθοδο Φωκά

- Unified Tranforms and classical spectral theory of operators, B. Pelloni
- Functional Analytic Framework of the Fokas Method for Elliptic Boundary Value Problems, A. Ashton
- Stochastic Riez-Fractional Partial Differential Equation with White Noise on the Half-Line, M. Arciga
- Fokas method and Kelvin transforma-tion applied to potential problems in non convex unbounded domains, M. Hadjinikolaou
- Eigenvalues and eigenfunctions for the Laplace Operator, K. Kalimeris
- Two numerical implementations of the Fokas method for elliptic equations in a polygon, K. Crooks
- Solving Wiener-Hopf problems without kernel factorisation, E. Luca
- The Fokas Method and Initial-Boundary Value Problems for Multidimensional Integrable PDEs, I. Hitzazis

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σχήμα 2: Παρουσίαση στην Ημερίδα για τη Μέθοδο Φωκά

Σχήμα 3: Παρουσίαση στην Ημερίδα για τα Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1.4 Διεθνή Συνέδρια

Στο πλαίσιο διάχυσης των αποτελεσμάτων παρουσιάσαμε τις επιστημονικές εργασίες μας στα ακόλουθα συνέδρια:

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ				
ΤΙΤΛΟΣ	ΤΟΠΟΘΕΣΙΑ	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ	ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ	ΒΡΑΒΕΙΑ
NUMAN 2012	Ιωάννινα Sept 2012	3	-	-
PDE Software Frameworks	Münster Jun 2012	1 (Poster)	-	-
ICAEM 2013	London Jul 2013	1	1	-
ICPDC 2013	London Jul 2013	1	1	1
IC-MSQUARE 2013	Prague Sept 2013	4	4	-
MCQMC2014	Leuven April 2014	1	1	-
IEEE FCCM 2014	Boston May 2014	1	1	-
IEEE ASAP 2014	Zurich Jun 2014	1	1	1
NumAn 2014	Chania Sept 2014	12	3	1
CMA 2014	Kuwait Nov 2014	3	-	-
ICAEM 2015	London Jul 2015	2	2	1
ICPDC 2015	London Jul 2015	2	2	2
PMAMCM 2015	Zakynthos Jul 2015	2	2	-
WHH 2015	Zakynthos Jul 2015	1	1	-
IISA 2015	Cofru Jul 2015	1	1	-
FICloud 2015	Rome Aug 2015	1	1	-
ParCo 2015	Edinburgh Sept 2015	1	1	-
ICNAAM 2015	Rodos Sept 2015	1	1	-
PCI 2015	Athens Oct 2015	1	1	-
MMCTSE 2015	Bratislava Nov 2015	3	3	-

2 Παραδοτέα

2.1 Ανάπτυξη και υποστήριξη ιστοσελίδας

Η ανάπτυξη και η οργάνωση της ιστοσελίδας πραγματοποιήθηκε λαμβάνοντας υπ'όψιν την ανάγκη για ένα δικτυακό τόπο επιστημονικού περιεχομένου σε λιτό πλαίσιο γραφικών, με έμφαση στην ευκολία της πλοήγησης και τη σαφήνεια του περιεχομένου του. Το περιεχόμενο του ιστότοπου οργανώθηκε έτσι ώστε να υπάρχει η δυνατότητα εύκολης μετάβασης του χρήστη από μια σελίδα σε άλλη, προκειμένου να καθίσταται εύκολη και η αναζήτηση των πληροφοριών. Για το λόγο αυτό επιλέχθηκε σταθερή οριζόντια μπάρα πλοήγησης, στην οποία και καταχωρήθηκαν οι βασικές σελίδες με το περιεχόμενο. Επιπλέον, σταθερές αποφασίστηκε να παραμένουν η περιοχή κάτω από τη μπάρα πλοήγησης με τον τίτλο του έργου και φωτογραφίες από συναντήσεις και παρουσιάσεις ερευνητικών εργασιών, η περιοχή του υποσέλιδου με το χάρτη του ιστότοπου και τα λογότυπα των ερευνητικών ιδρυμάτων που συμμετέχουν στο έργο. Τέλος, σε σταθερές θέσεις κατά τη διάρκεια της πλοήγησης βρίσκονται τόσο το λογότυπο του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς, πηγής χρηματοδότησης του έργου, όσο και το λογότυπο του ερευνητικού προγράμματος ΘΑΛΗΣ (πάνω αριστερά και πάνω δεξιά αντίστοιχα). Το φόντο της ιστοσελίδας σε όλη τη διάρκεια της πλοήγησης παραμένει το ίδιο, εμφανίζοντας μια κατάλληλα επεξεργασμένη απεικόνιση της γραφικής παράστασης των πολυωνύμων Hermite, σε δύο διαστάσεις, τα οποία χρησιμοποιούνται στην αριθμητική μέθοδο Collocation.
Ακολουθούν οι βασικές σελίδες οι οποίες συναποτελούν τον ιστότοπο καθώς και πληροφορίες για τις επιμέρους σελίδες τους, με τους τίτλους στην Ελληνική και την Αγγλική:

Αρχή/Home *Η Αρχική σελίδα της ιστοσελίδας*

Στην αρχική σελίδα της ιστοσελίδας παρουσιάζονται ο τίτλος του έργου και οι χρονικά τελευταίες τέσσερις ανακοινώσεις. Σε κάθε περιοχή υπάρχει ενεργός σύνδεσμος ο οποίος οδηγεί στην αντίστοιχη διεύθυνση (εικόνα 4).

Περιγραφή Έργου/The Project *Περιγραφή του έργου με πληροφορίες για τις δραστηριότητες του έργου*

Στη σελίδα Περιγραφή Έργου δίνεται αρχικά μια εισαγωγή στα Προβλήματα εφαρμογών ετερογενών υλικών με τα οποία ασχολείται το έργο και γίνεται αναφορά στους γενικούς στόχους (εικόνα 5). Ενεργοί σύνδεσμοι κατευθύνουν το χρήστη σε σελίδες με αναλυτική περιγραφή κάθε προβλήματος που μελετάται στο έργο (Προβλήματα Ιατρικής, Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής (εικόνα 8). Η πρόσβαση στην αναλυτική περιγραφή των Προβλημάτων είναι δυνατή και από το υπομενού της οριζόντιας μπάρας πλοήγησης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Επιλέγοντας το σύνδεσμο Δράσεις-Παραδοτέα στην Περιγραφή Έργου, ο χρήστης μπορεί να πάρει πληροφορίες για τα πέντε Πακέτα Εργασίας του έργου και τις δράσεις οι οποίες προβλέπονται στο Τεχνικό Δελτίο για κάθε Πακέτο (εικόνα 6). Ακολουθώντας το σύνδεσμο κάθε δράσης, εμφανίζεται η αναλυτική της περιγραφή, τα παραδοτέα που ορίζει το ΤΔ καθώς και η Ερευνητική Ομάδα που έχει αναλάβει να υλοποιήσει το μεγαλύτερο μέρος της (εικόνα 7). Τέλος, η επιλογή του συνδέσμου Σύνδεσμοι δίνει στο χρήστη τη δυνατότητα μετάβασης στους ιστοτόπους του Προγράμματος ΕΣΠΑ-ΘΑΛΗΣ, της διαδικτυακής Πύλης ΘΑΛΗΣ, του Αποθετηρίου ΘΑΛΗΣ και των συνεργαζόμενων ερευνητικών ιδρυμάτων μέσω ανακατεύθυνσης (εικόνα 9).

Ερευνητικές Ομάδες/Research Teams *Οι συνεργαζόμενοι εταίροι*

Η σελίδα Ερευνητικές Ομάδες/Research Teams περιλαμβάνει πληροφορίες για τα μέλη των Κύριων Ερευνητικών Ομάδων (Κ.Ε.Ο) και των Ομάδων Εξωτερικών Συνεργατών που απασχολούνται ή απασχολήθηκαν σε δράσεις του έργου, ομαδοποιημένα με βάση το Εκπαιδευτικό Ίδρυμα στο οποίο ανήκουν (εικόνα 10). Επιλέγοντας το σύνδεσμο κάθε Ερευνητικής Ομάδας, ο χρήστης μπορεί να λάβει πληροφορίες για τις δράσεις στις οποίες συμμετέχει, τα μέλη της (ονοματεπώνυμο, τίτλο, ιδιότητα) καθώς και την εργαστηριακή υποδομή της, μέσω του παρεχόμενου συνδέσμου (εικόνα 11). Επίσης, υπάρχει δυνατότητα αποστολής ηλεκτρονικής αλληλογραφίας σε κάθε μέλος, μέσω κατάλληλου λογισμικού, πατώντας το σύνδεσμο σε κάθε όνομα.

Επιπλέον, από τη συγκεκριμένη σελίδα υπάρχει δυνατότητα πρόσβασης στη σελίδα των ετήσιων συναντήσεων των Ερευνητικών Ομάδων (εικόνα 12). Σε αυτήν, υπάρχουν πληροφορίες για το αναλυτικό πρόγραμμα της συνάντησης, φωτογραφίες καθώς και οι παρουσιάσεις που πραγματοποιήθηκαν, οι οποίες είναι και διαθέσιμες για λήψη.

Δημοσιεύσεις/Publications *Οι δημοσιεύσεις του έργου*

Στη σελίδα Δημοσιεύσεις ο χρήστης μπορεί να βρει όλες τις ερευνητικές εργασίες που έχουν πραγματοποιηθεί καθώς και τις διατριβές που έχουν εκπονηθεί στα πλαίσια του έργου . Η σελίδα χωρίζεται σε τρεις ενότητες: Δημοσιεύσεις σε Πρακτικά Διεθνών Συνεδρίων (εικόνα 13), Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά και Διατριβές (εικόνα 14). Σε κάθε αναφορά δημοσίευσης ακολουθούν πληροφορίες για τους συγγραφείς και το συνέδριο στο οποίο παρουσιάστηκε ή το περιοδικό στο οποίο δημοσιεύτηκε, και βραβείο το οποίο πιθανόν απέσπασε, ενώ κατάλληλος σύνδεσμος δίνει τη δυνατότητα ανακατεύθυνσης στην ιστοσελίδα του συνεδρίου/περιοδικού. Επίσης υπάρχει η δυνατότητα ανάγνωσης ή λήψης του αρχείου της ερευνητικής εργασίας.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Μέσω της οριζόντιας μπάρας πλοήγησης της σελίδας Δημοσιεύσεις, υπάρχει επίσης πρόσβαση στη σελίδα Workshops@NumAn 2014 (εικόνα 15). Στη συγκεκριμένη σελίδα, μπορεί να βρεθεί το σύνολο των παρουσιάσεων των συμμετεχόντων μελών του έργου στα Workshops του Διεθνούς Συνεδρίου Αριθμητικής Ανάλυσης 2014, που πραγματοποιήθηκε στα Χανιά Κρήτης, απο 2 εώς 5 Σεπτεμβρίου 2014. Παράλληλα, ενεργός σύνδεσμος στη σελίδα δίνει τη δυνατότητα ανακατεύθυνσης στην Ψηφιακή Βιβλιοθήκη του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Ηλεκτρονικών Υπολογιστών του Πολυτεχνείου Κρήτης, όπου και μπορεί να γίνει λήψη του συνόλου των ερευνητικών εργασιών του συνεδρίου.

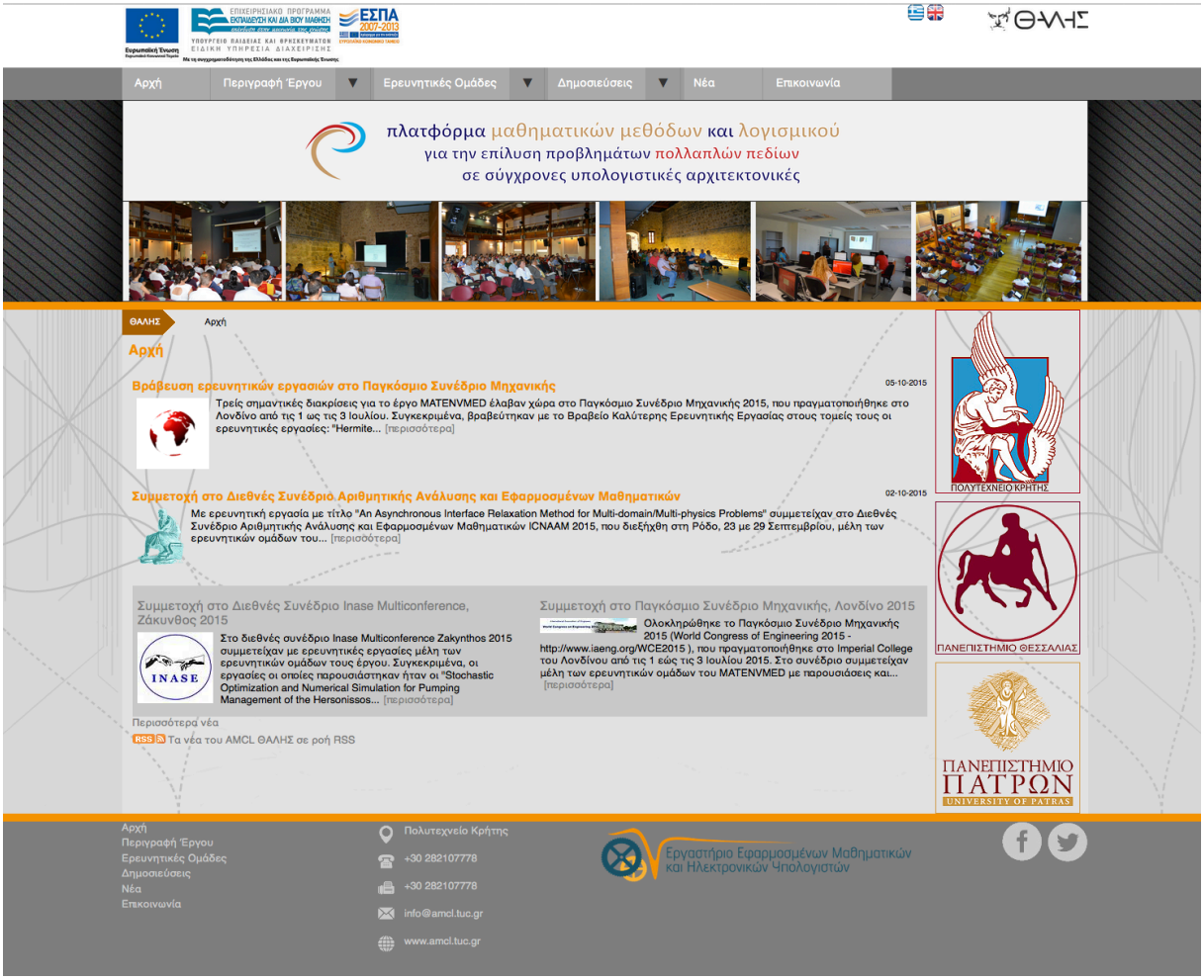
Νέα/News *Το σύνολο των ανακοινώσεων στα πλαίσια του έργου*
Στη σελίδα προστίθενται όλα τα νέα και οι ανακοινώσεις στην εξέλιξη του έργου. Ο χρήστης μπορεί να βρει πληροφορίες για συμμετοχές σε συνέδρια, συναντήσεις ερευνητικών ομάδων, βραβεύσεις, κτλ (εικόνα 16).

Επικοινωνία/Contact *Στοιχεία επικοινωνίας με μέλη των ερευνητικών ομάδων*
Η σελίδα Επικοινωνία περιλαμβάνει τα αναλυτικά στοιχεία επικοινωνίας με το συντονιστή του έργου, τους υπευθύνους των ερευνητικών ομάδων και το διαχειριστή του ιστοτόπου (εικόνα 17).

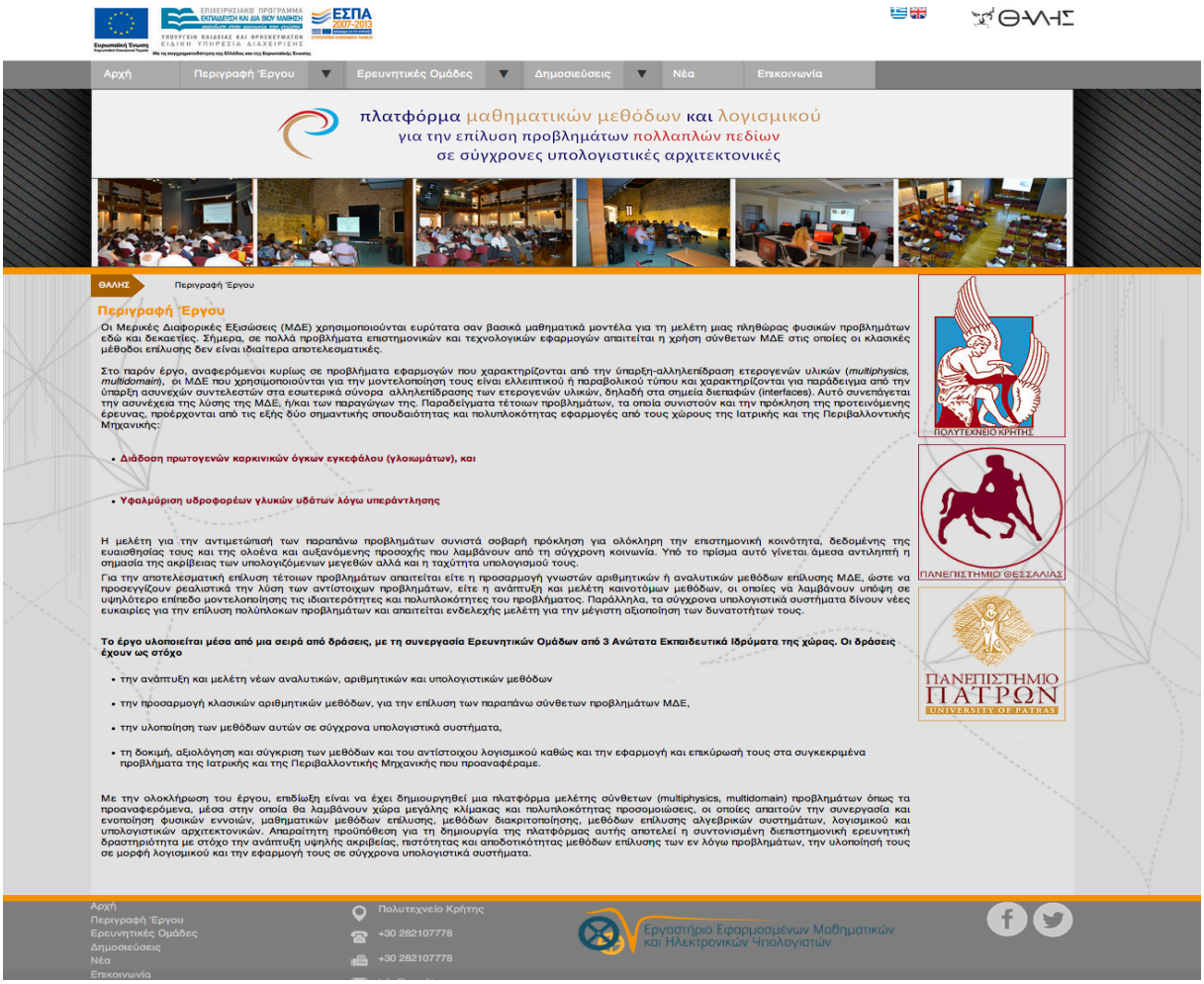
Το σύνολο των πληροφοριών των παραπάνω σελίδων είναι διαθέσιμες και στην αντίστοιχη έκδοση Αγγλικής γλώσσας του ιστότοπου.

Στη συνέχεια ακολουθούν εικόνες των επιμέρους σελίδων της ιστοσελίδας που αναπτύχθηκε στα πλαίσια του έργου, όπως περιγράφηκε παραπάνω.

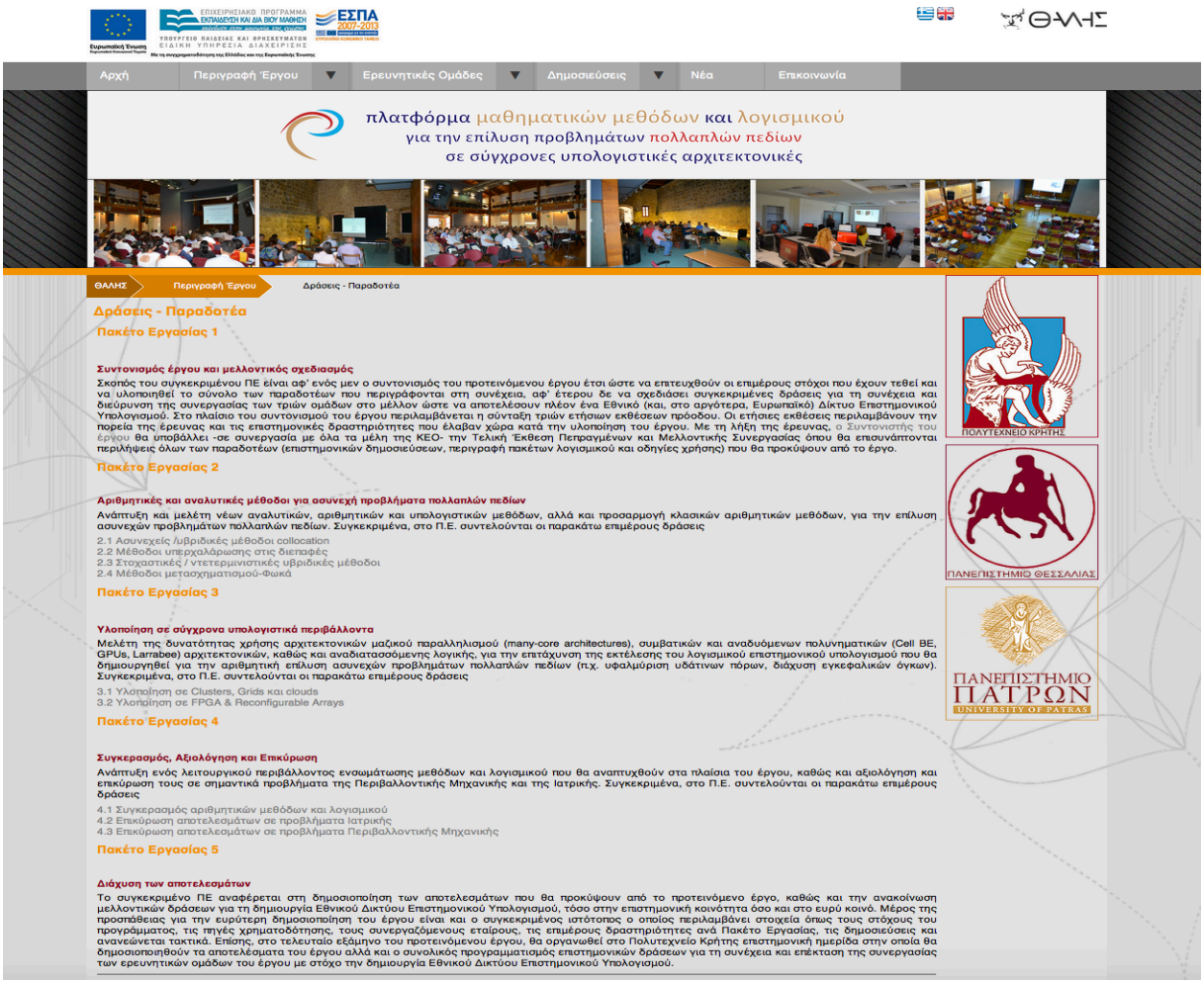
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 4: Η αρχική σελίδα του έργου

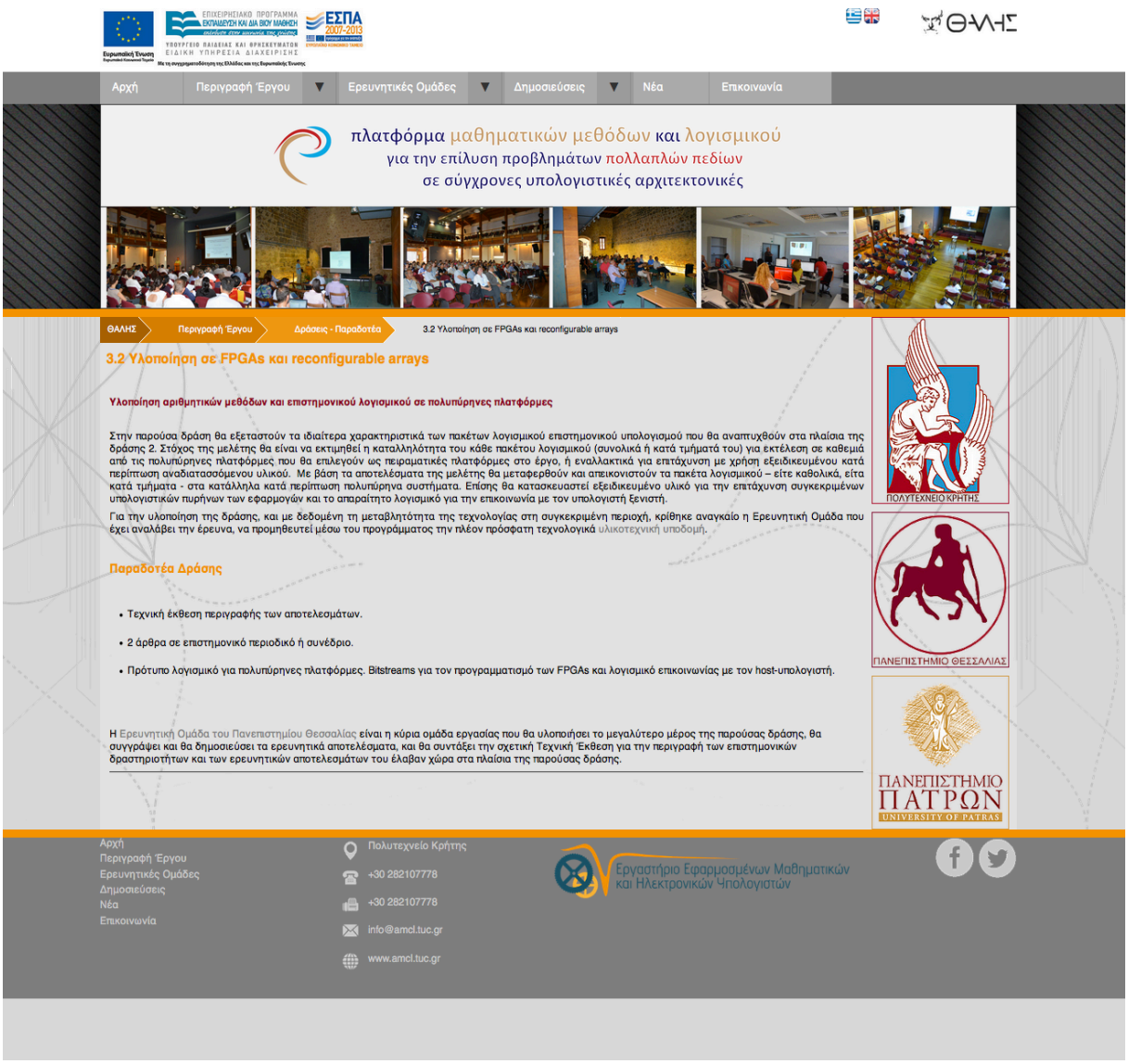


Σχήμα 5: Περιγραφή Έργου

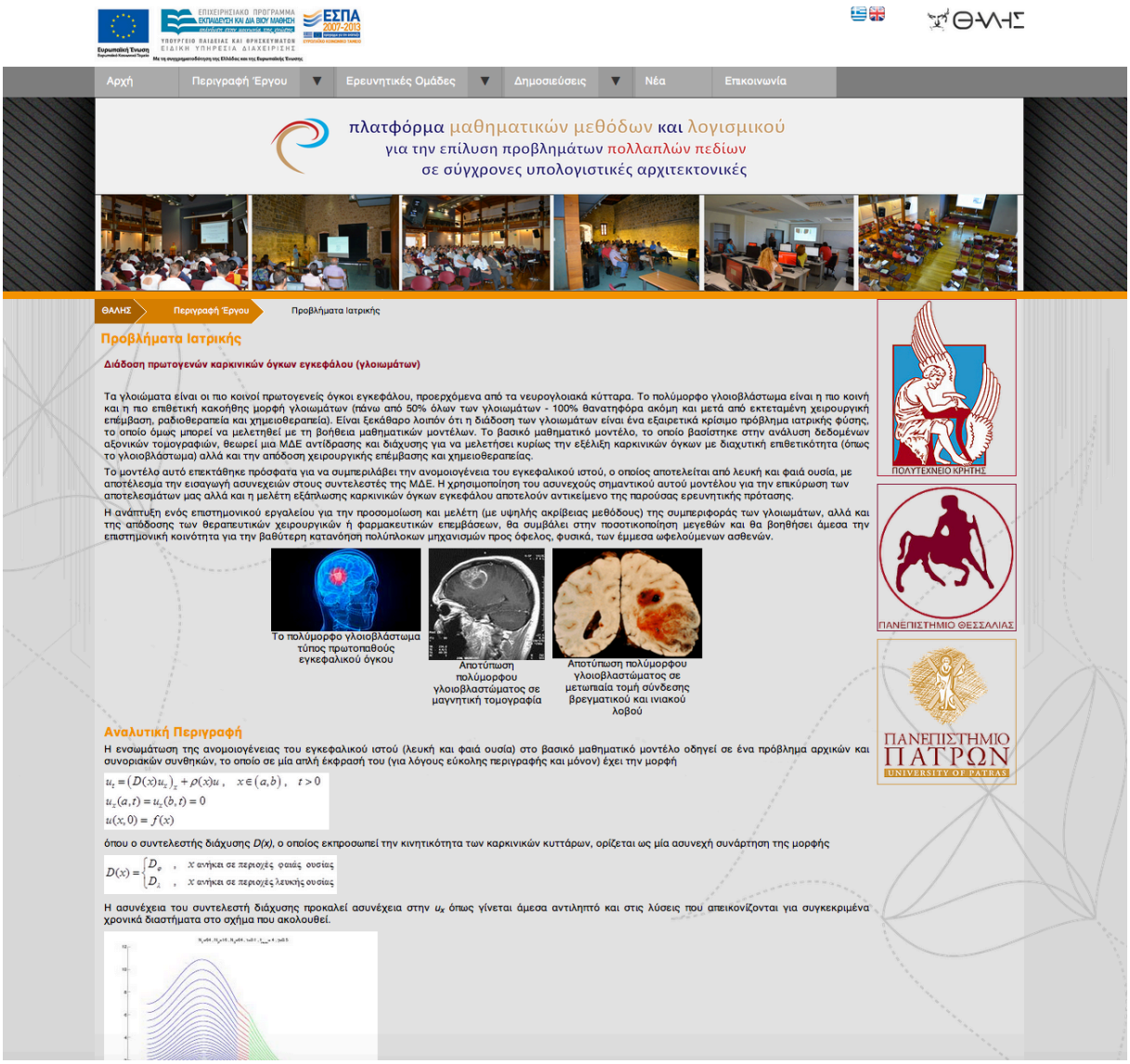


Σχήμα 6: Δράσεις - Παραδοτέα

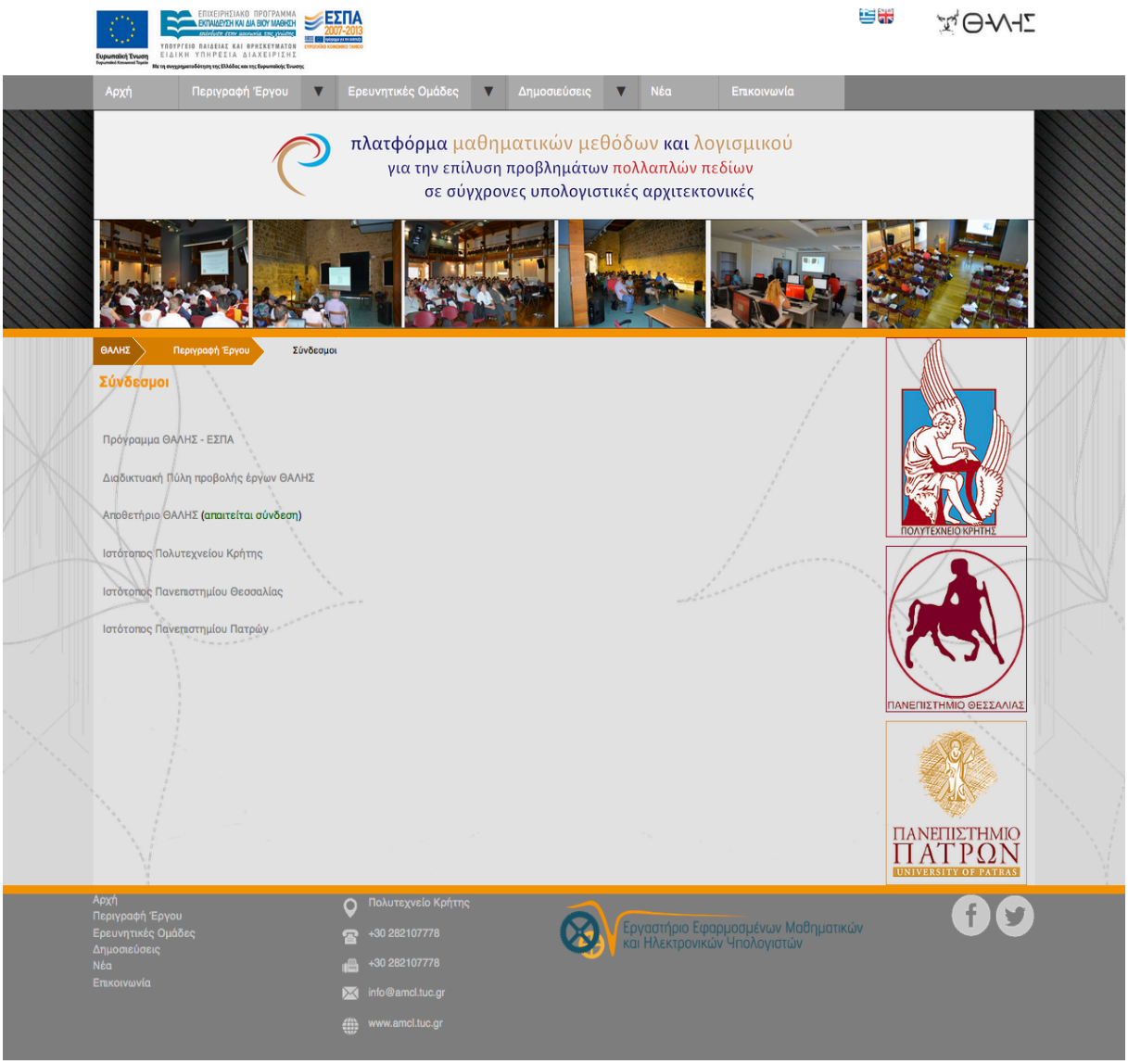
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



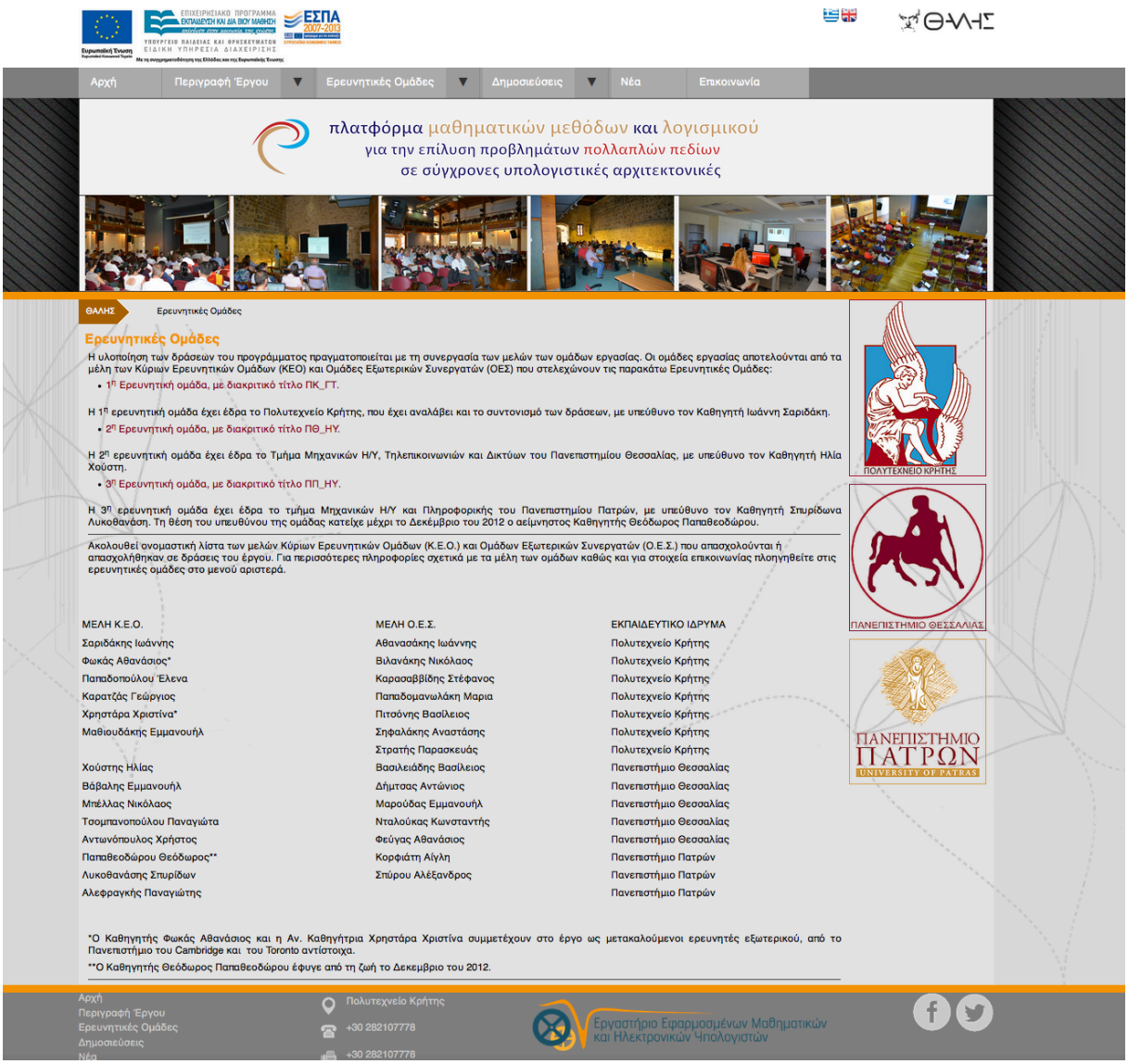
Σχήμα 7: Αναλυτική Περιγραφή Δράσης



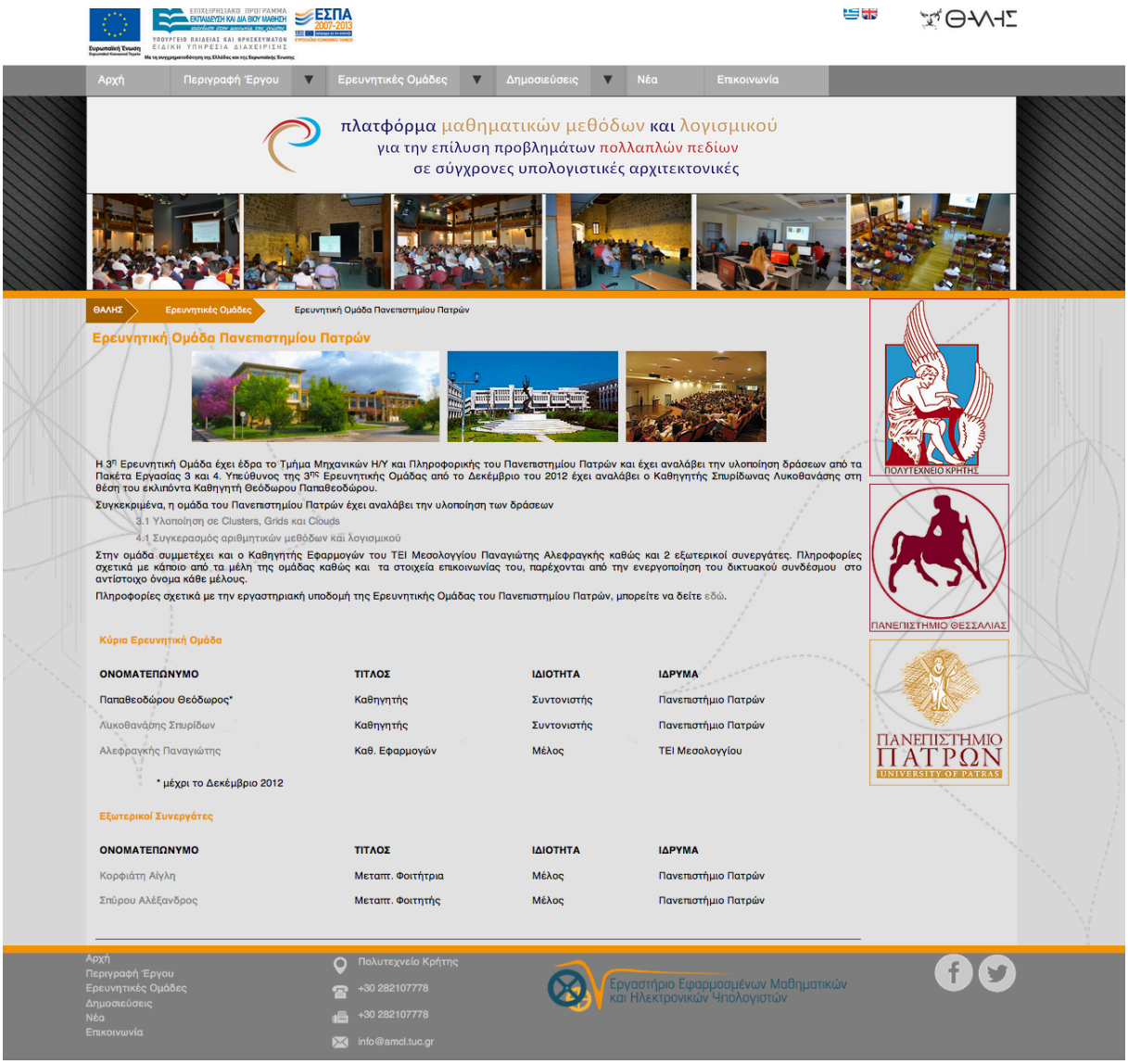
Σχήμα 8: Προβλήματα Ιατρικής



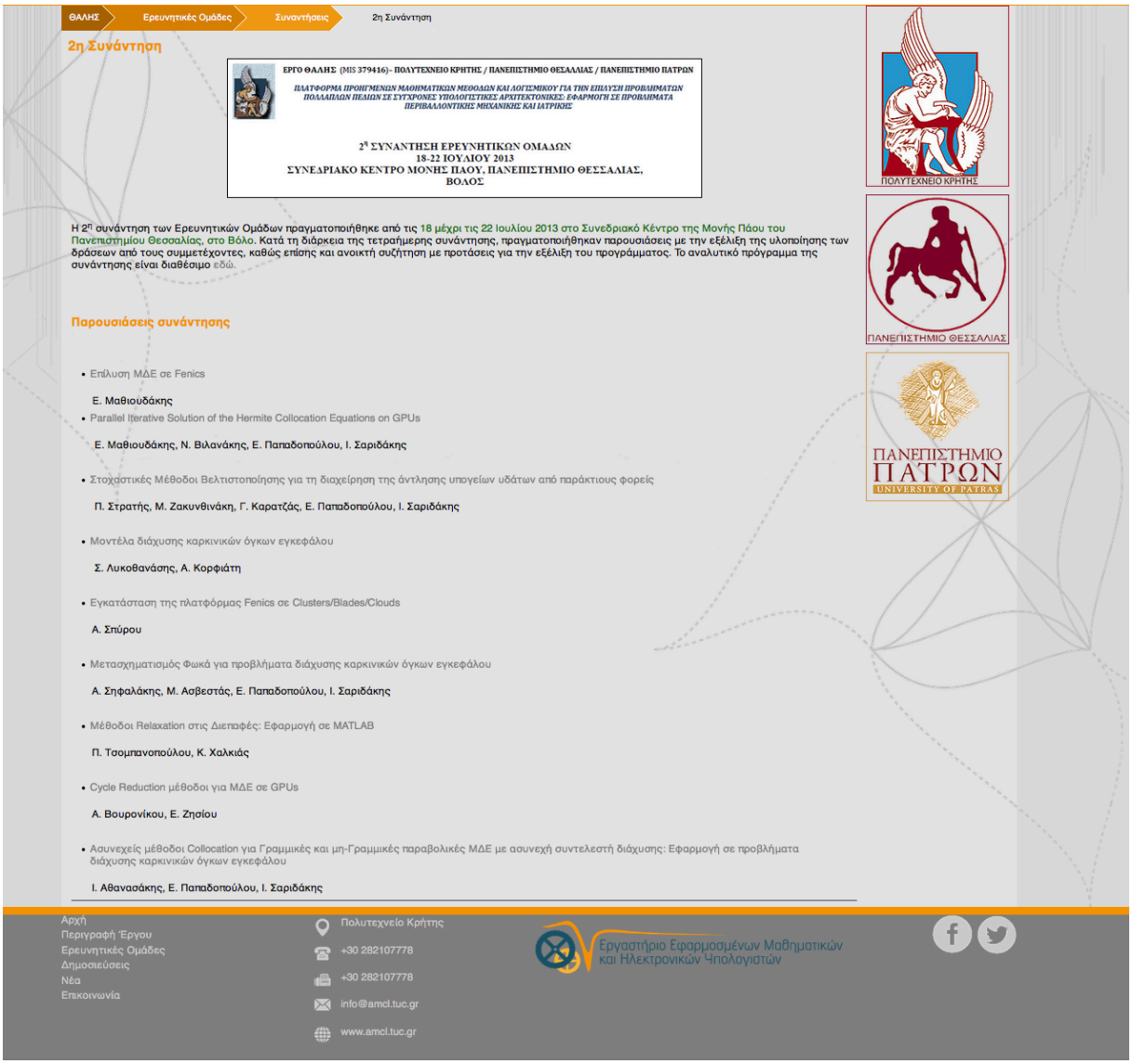
Σχήμα 9: Σύνδεσμοι



Σχήμα 10: Ερευνητικές Ομάδες

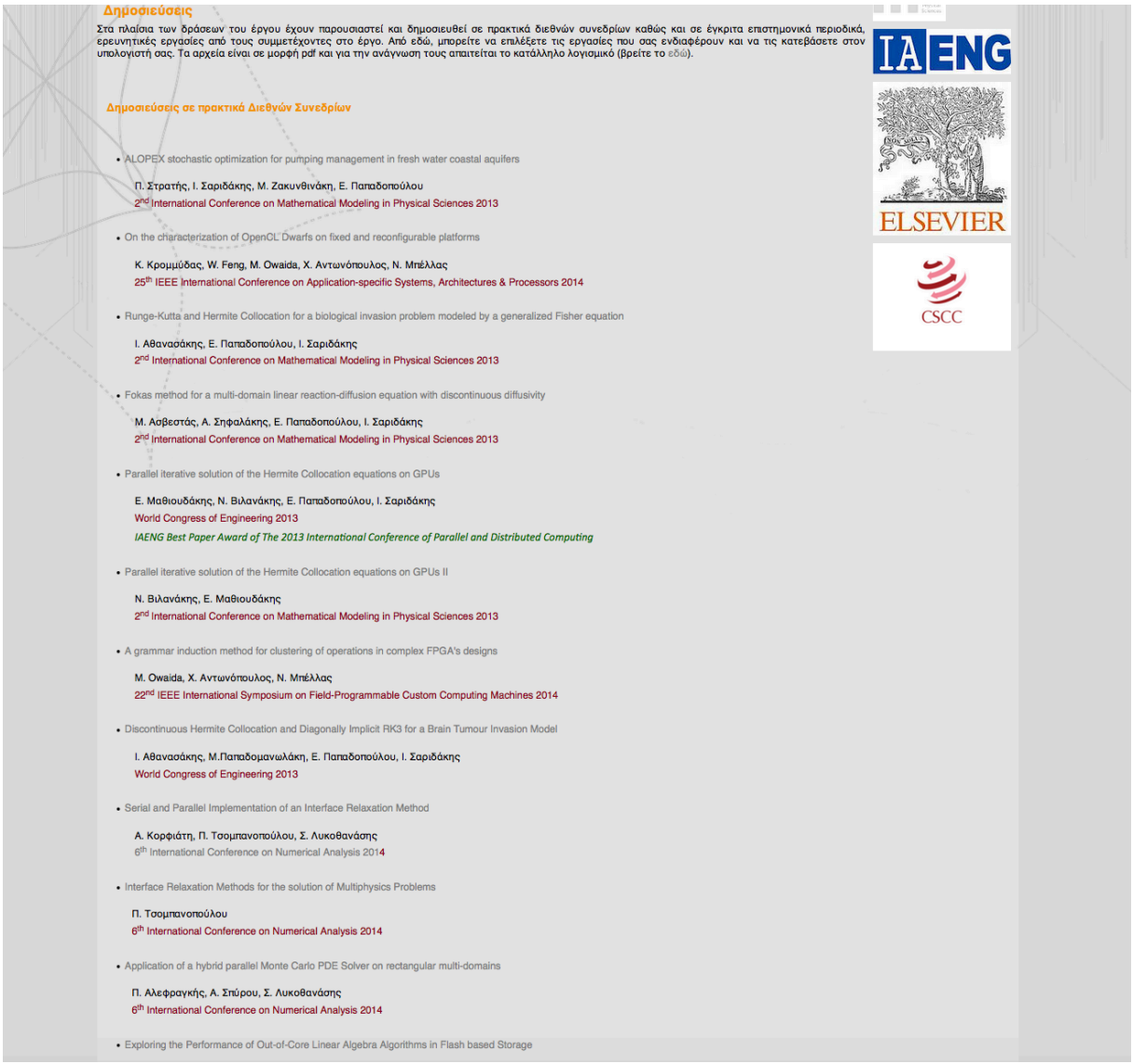


Σχήμα 11: Αναλυτική Περιγραφή Ερευνητικής Ομάδας



Σχήμα 12: Πληροφορίες συναντήσεων

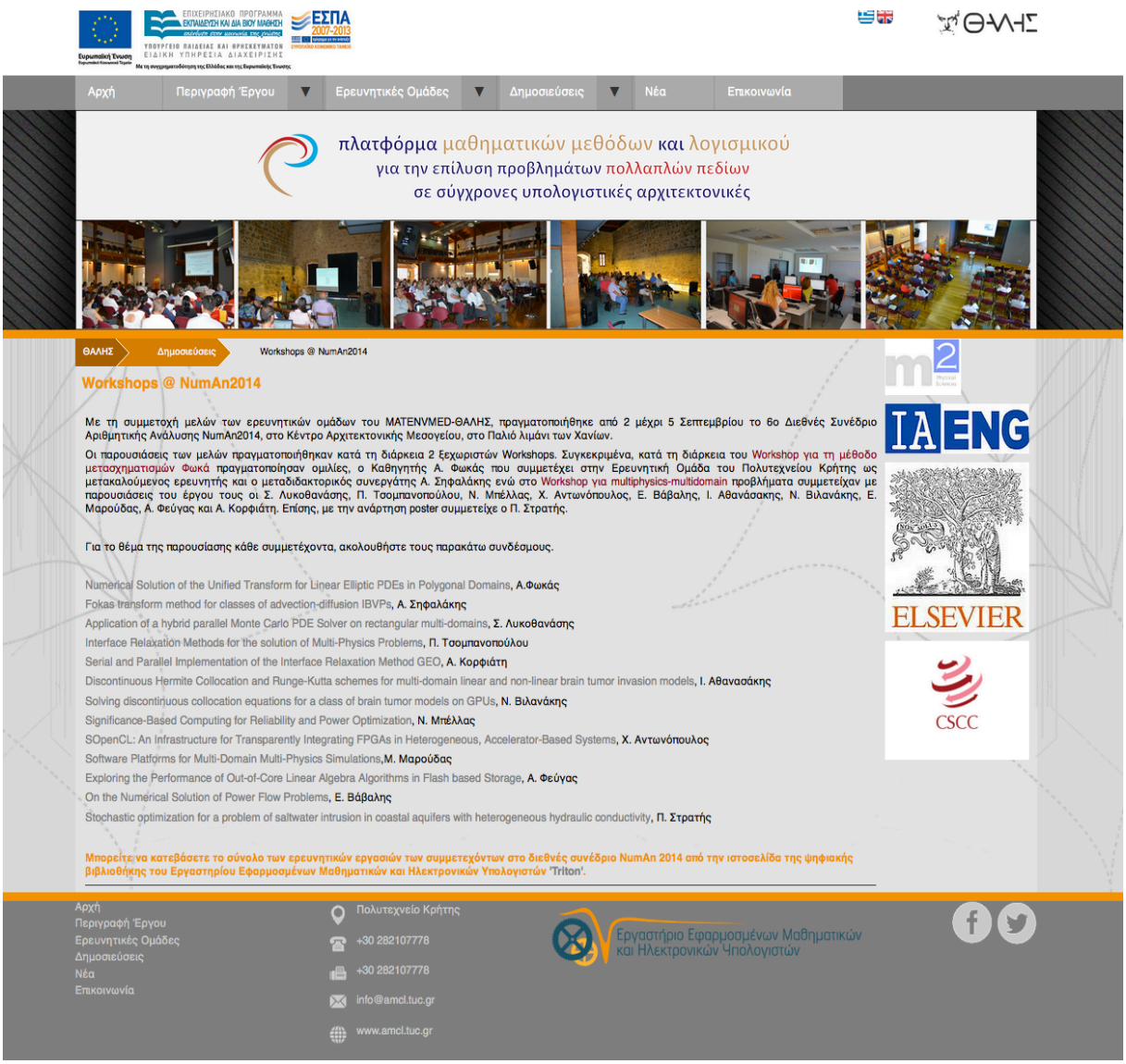
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



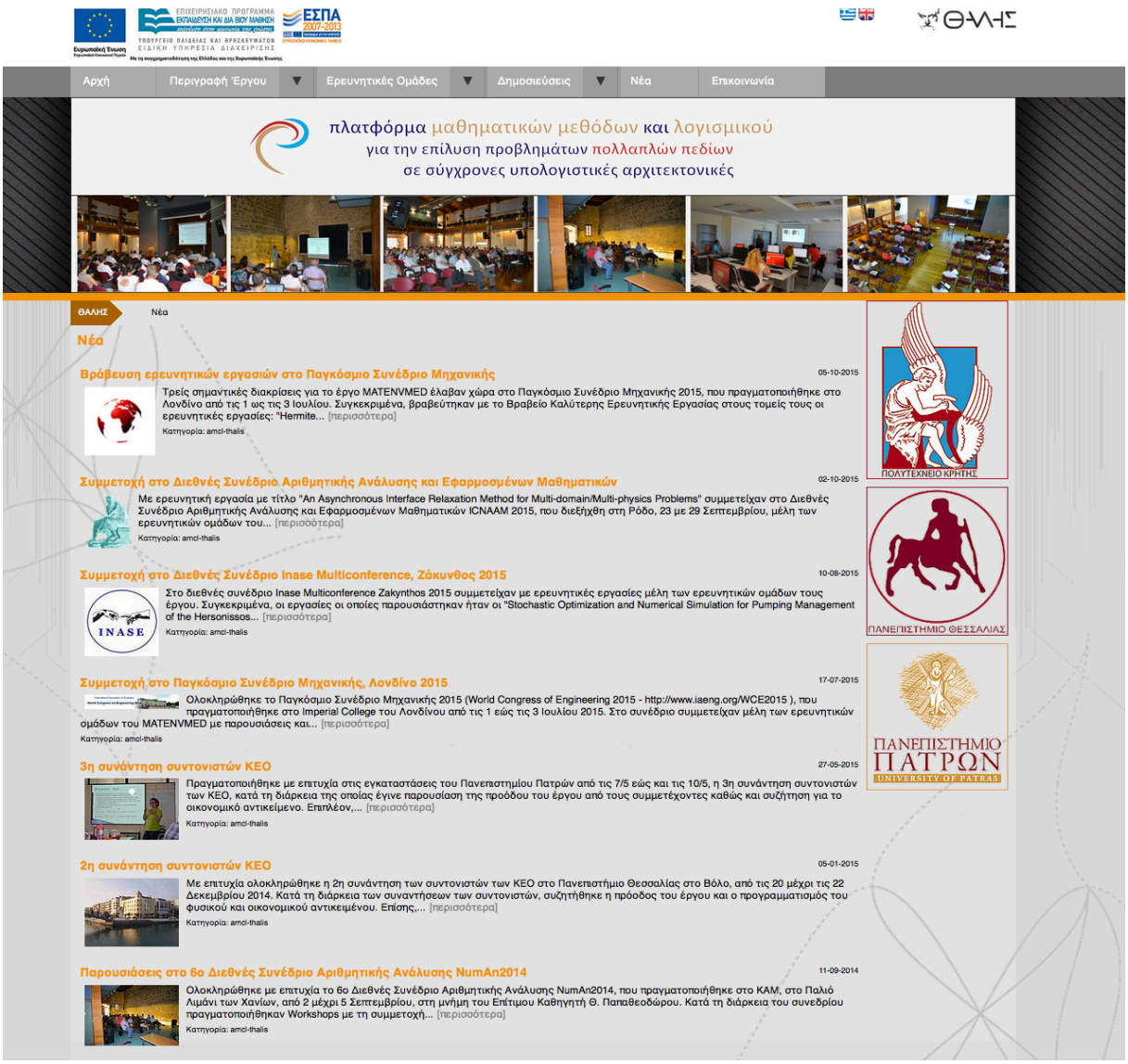
Σχήμα 13: Δημοσιεύσεις σε Πρακτικά Συνεδρίων

Σχήμα 14: Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά περιοδικά και Διατριβές

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

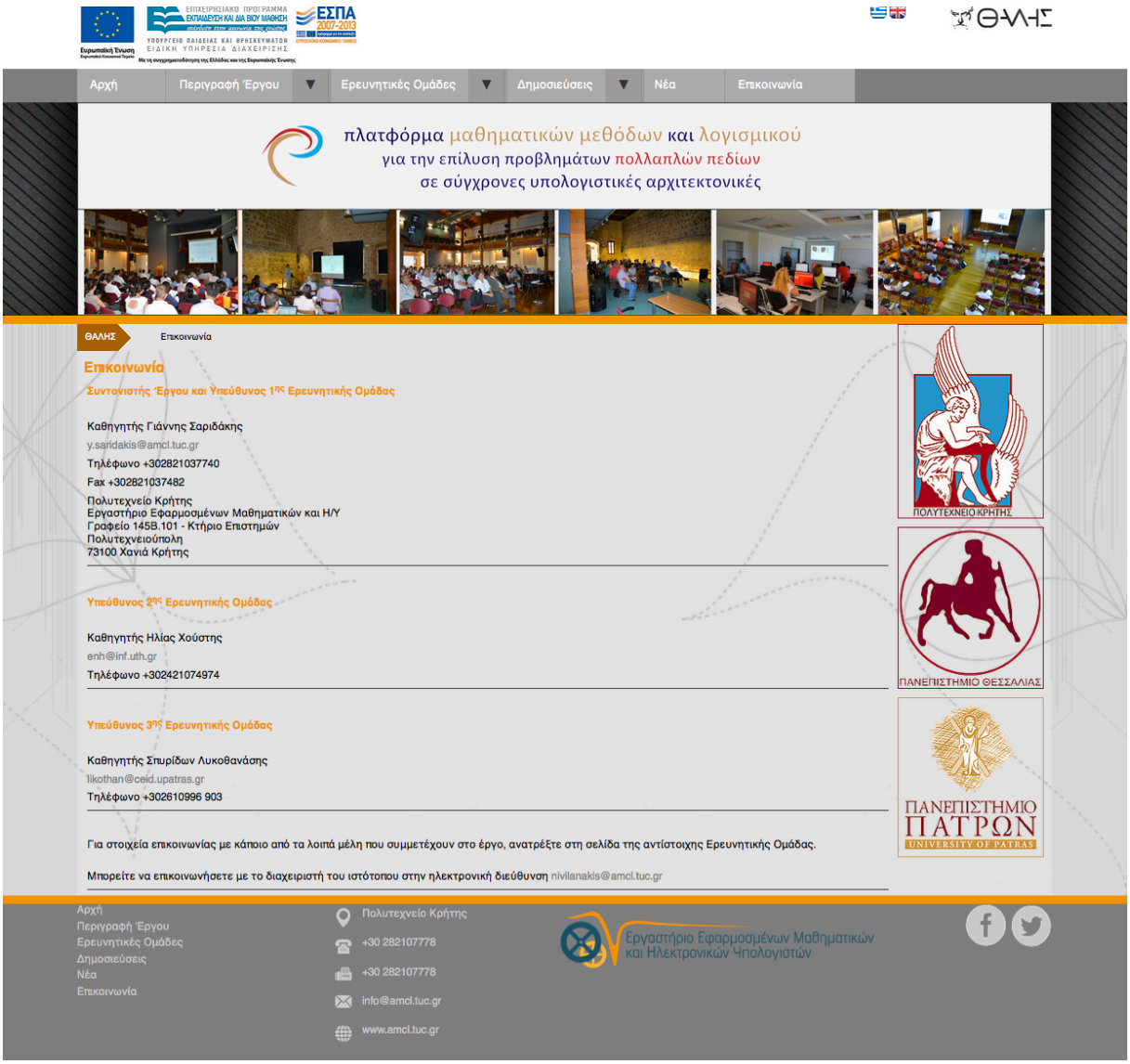


Σχήμα 15: Πληροφορίες για τις παρουσιάσεις στα Workshops του NumAn2014



Σχήμα 16: Ανακοινώσεις

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 17: Επικοινωνία

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.2 Πρακτικά ημερίδας σε ηλεκτρονική μορφή

Στις 14 Νοεμβρίου 2015 πραγματοποιήθηκε η Ημερίδα Παρουσίασης των Αποτελεσμάτων του έργου. Η ημερίδα ήταν ανοικτή στο κοινό ενώ παραβρέθηκαν και παρακολούθησαν όλες τις διαλέξεις οι αξιολογητές του έργου και αντιπροσωπεία της Πρυτανείας του Πολυτεχνείου Κρήτης. Συμμετείχαν όλα τα μέλη των ερευνητικών ομάδων και παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα όλων των δράσεων του έργου μέσα από 10 διαλέξεις και 9 πόστερ. Όλο το ψηφιακό υλικό, που αποτελεί και τα πρακτικά της ημερίδας, είναι διαθέσιμο από την Ιστοσελίδα του έργου στη διεύθυνση **Ημερίδα Παρουσίασης Αποτελεσμάτων**.

Συνοπτικά αναφέρουμε ότι δόθηκαν οι εξής διαλέξεις:

- Απολογισμός Έργου
- Αριθμητικές Μέθοδοι Collocation / Απεικόνιση σε σύγχρονες Υπολογιστικές Αρχιτεκτονικές
- Αναλυτικές Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά
- Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης ALOPEX
- Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές
- Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι
- Υβριδικές Πλατφόρμες Επίλυσης ΜΔΕ
- Πλατφόρμα Πεπερασμένων Στοιχείων FEniCS
- Παράλληλες Υπολογιστικές Αρχιτεκτονικές
- FPGA's & Πολυπύρηνα Συστήματα

και εκτέθηκαν τα εξής πόστερ:

- Υβριδικές / Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation
- Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές
- Υβριδικές Πλατφόρμες Επίλυσης ΜΔΕ
- Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά
- Υλοποίηση σε παράλληλες αρχιτεκτονικές: IRaaS
- Υλοποίηση σε FPGAs και Πολυπύρηνα Συστήματα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού
- Επικύρωση αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής
- Στοχαστικές Μέθοδοι Βελτιστοποίησης ALOPEX για Διαχείριση αντλήσεων παράκτιων υδροφορέων

3 Συνεργασίες

Στην παρούσα Δράση υπήρξε συνεργασία μεταξύ μελών όλων των ερευνητικών ομάδων του έργου τόσο στις προδιαγραφές της ιστοσελίδας όσο και στη προετοιμασία των ημερίδων. Την ευθύνη ανάπτυξης και διαχείρισης της ιστοσελίδας καθώς και την επιμέλεια του περιεχομένου ανέλαβε ο εξωτερικός συνεργάτης Υπ. Διδ. Νικόλαος Βιλανάκης ενώ την επιμέλεια των γραφικών της ιστοσελίδας και την ανάρτηση σε δικτυακό τόπο του Πολυτεχνείου Κρήτης οι εξωτερικοί συνεργάτες Βασίλειος Πιτσόνης και Στέφανος Καρασαββίδης αντίστοιχα. Τα Workshops του Διεθνούς Συνεδρίου Αριθμητικής Ανάλυσης 2014 και η ημερίδα παρουσίασης των αποτελεσμάτων οργανώθηκαν με τη συνδρομή όλων των μελών της ερευνητικής Πολυτεχνείου Κρήτης σε συνεργασία με τις ερευνητικές ομάδες Θεσσαλίας και Πατρών.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης