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)

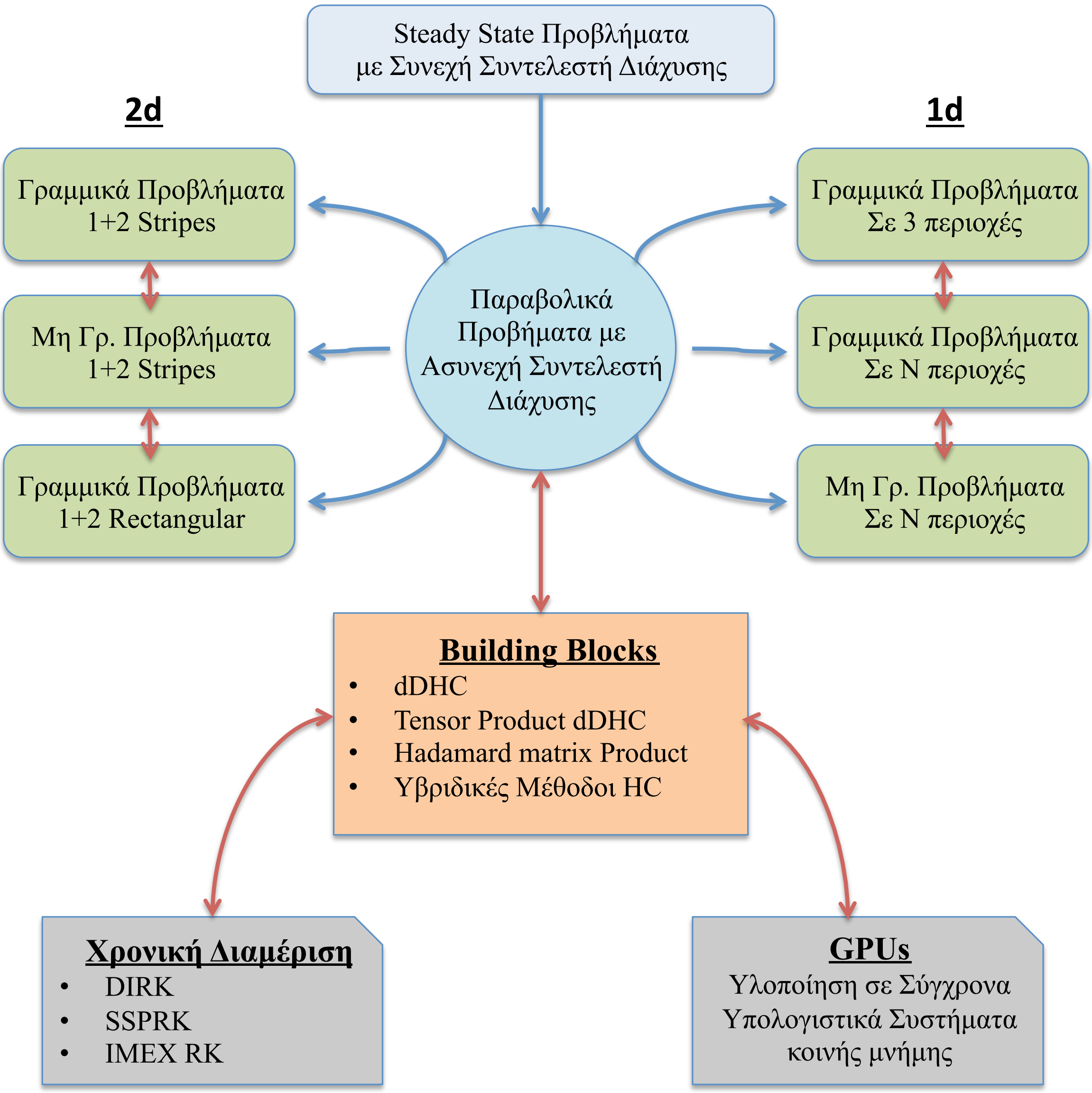
Δράση 2.1

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ 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 φορμαλισμού 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

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

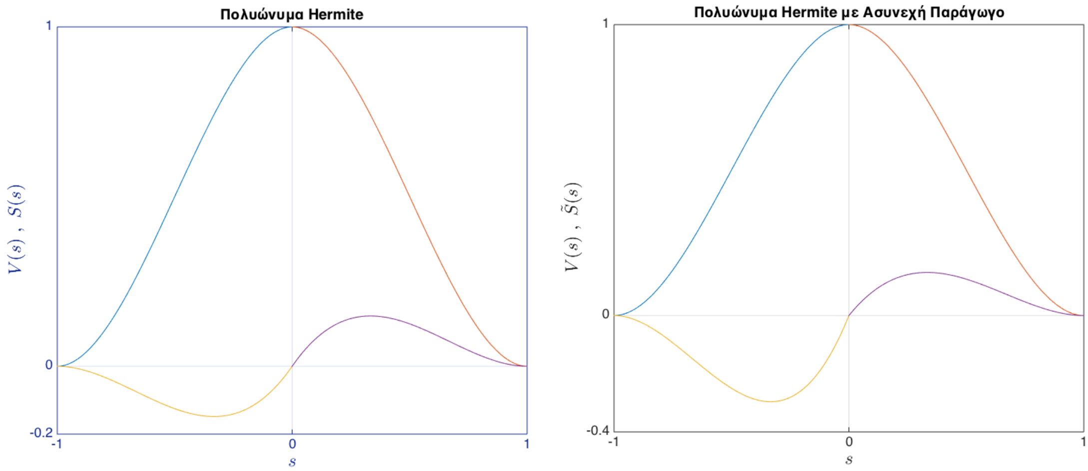
και απεικονίζονται στο Σχήμα 2a. Με βασικές ιδιότητες τις

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

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

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

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

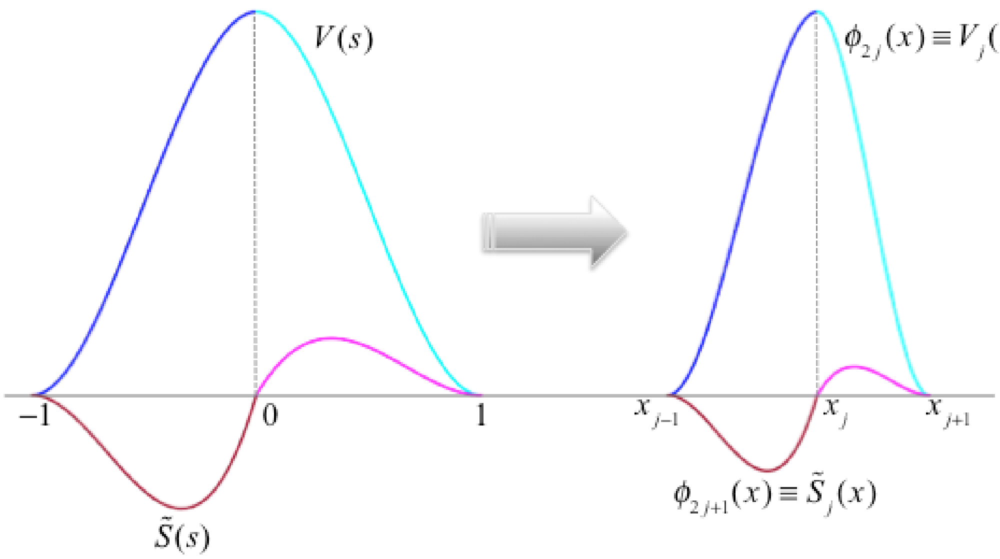
Η απεικόνιση των βασικών πολυωνύμων Hermite $V(s)$ και $\tilde{S}(s)$, με κέντρο το 0 και $s \in [-1,1]$, στα κυβικά πολυώνυμα Hermite $V_j(x)$ και $\tilde{S}_j(x)$, με κέντρο τον κόμβο x_j και $x \in [x_{j-1}, x_{j+1}]$, δίνονται από τις σχέσεις

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

και

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

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

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

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

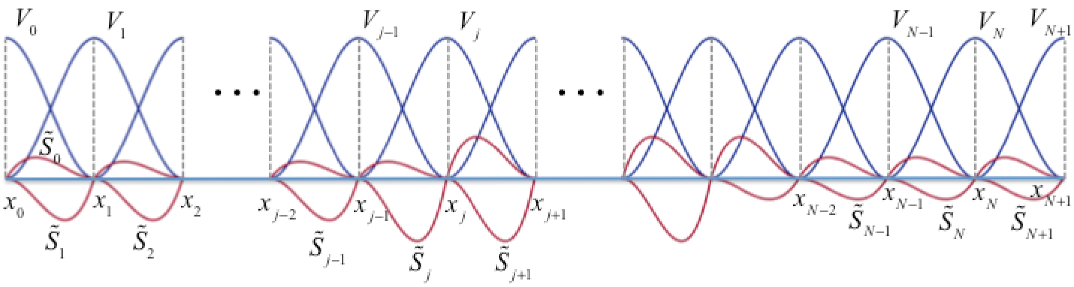
$$\dim(\tilde{\mathcal{H}}_D) = 4(N+1) - 2N = 2N + 4 = 2(N+2)$$

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 $0 \leq i, j \leq N+1$,

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

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

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

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

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

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

και συνεπώς

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

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. □

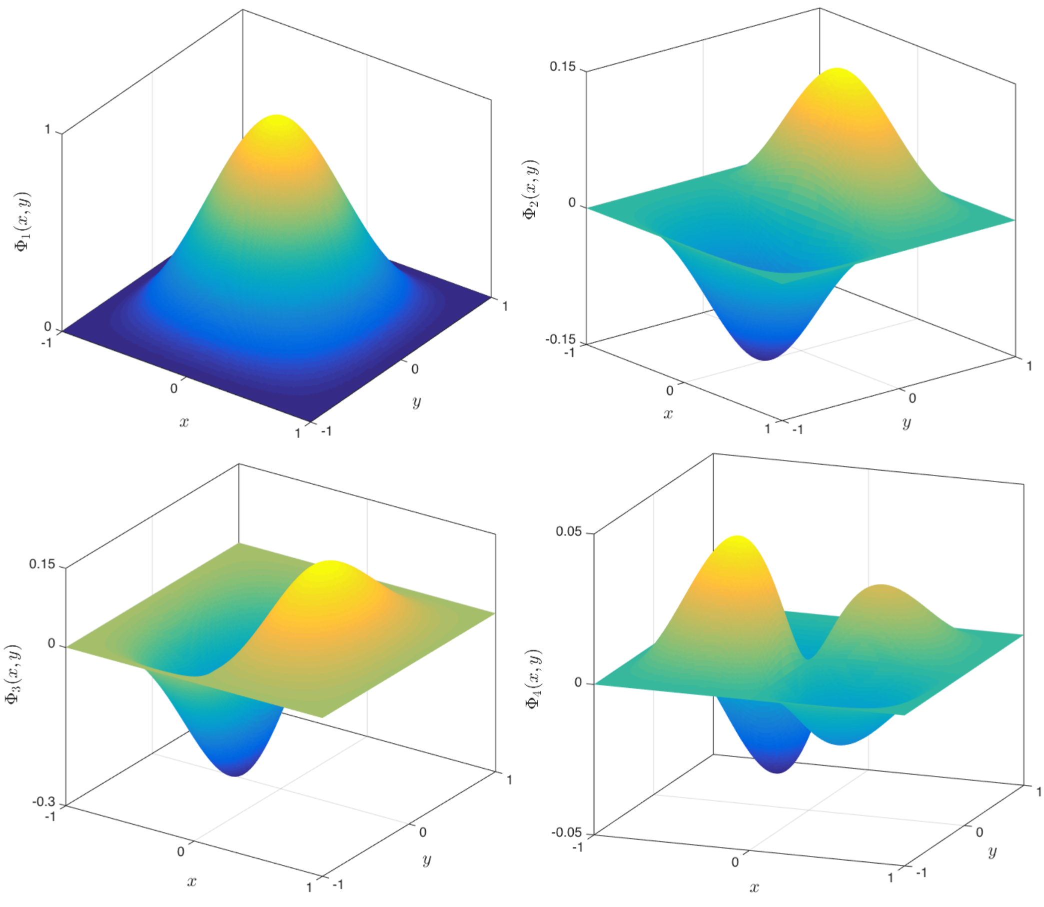
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ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

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:

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

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

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

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

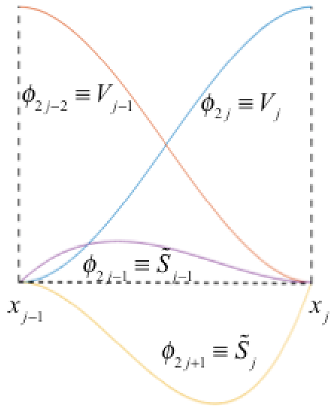
$$\frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} = \mathcal{L}\left[t, \sigma_i, \tilde{c}, D\frac{\partial \tilde{c}}{\partial x}\right] + \mathcal{N}\left[t, \sigma_i, \tilde{c}, D\frac{d\tilde{c}}{dx}\right], \; i = 1, \cdots, 2N+2 \tag{25}$$

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

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



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
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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

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

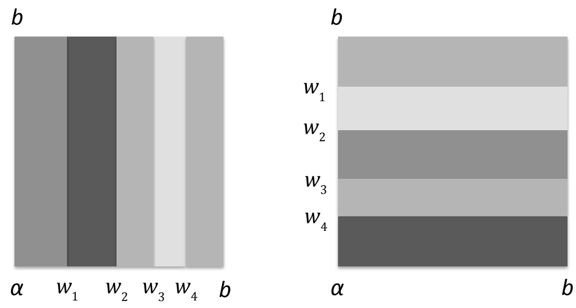
Τα διανύσματα $\tilde{A}_1^{(k)}$ και $\tilde{B}_{N+1}^{(k)}$ αποτελούνται από την πρώτη στήλη των πινάκων $A_1^{(k)}$ και $B_{N+1}^{(k)}$ αντίστοιχα, αφού η δεύτερη τους στήλη έχει διαγραφεί λόγω των μηδενικών συνοριακών συνθηκών (26).

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)* $\frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m \partial y^n}\tilde{c}(x,y,t)$*, με* $m,n = 0,1,2$ *και* $m+n \le 2$*, 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*

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

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).

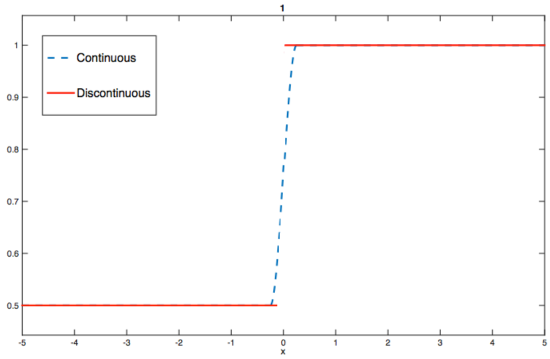
Στα προβλήματα μίας διάστασης, ο συντελεστής διάχυσης έχει τη γενική μορφή $D = D(x) = \gamma_k \in \mathbb{R}$ για $x \in [w_{k-1}, w_k]$, $k = 1,\ldots,K+1$ (βλ. Σχήμα 11) και προσεγγίζεται από μία συνεχή συνάρτηση $\tilde{D}$ που ορίζεται ως

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

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

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

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

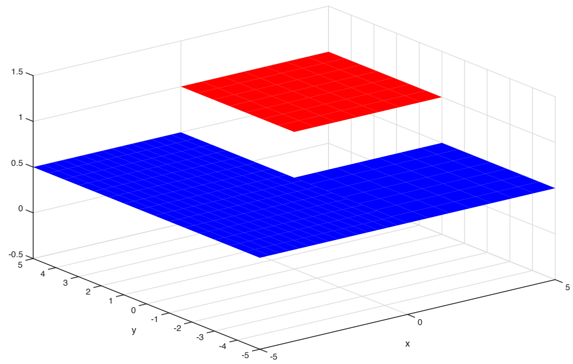


Σχήμα 8: Η προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με κυβικό πολυώνυμο.

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

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

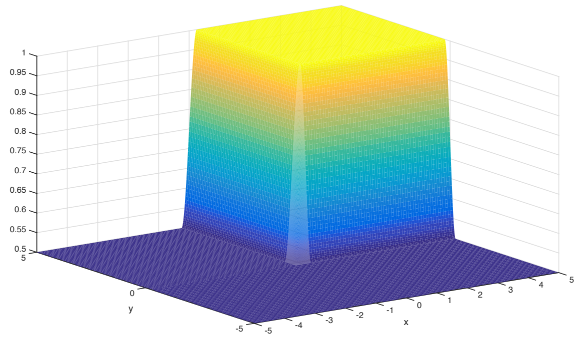
και προφανώς χαρακτηρίζεται από μία γωνιακή ασυνέχεια στο σημείο (w, w), όπως χαρακτηριστικά επιδεικνύεται στο Σχήμα 9.



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

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:

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



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
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

παραβολικών εξισώσεων της μορφής (1)

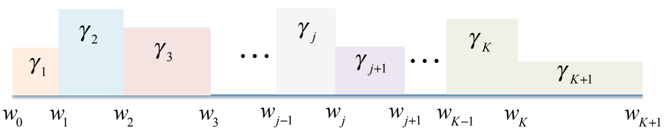
$$\begin{aligned}
&\frac{\partial c}{\partial t} = \mathcal{L}\left[t, x, c, D\frac{\partial c}{\partial x}\right] + \mathcal{N}\left[t, x, c, D\frac{dc}{dx}\right] \ , \ a < x < b \ , \ t > 0 \\
&c(x,0) = c_0(x) \\
&\frac{\partial c}{\partial x}(x,t)\mid_{x=a} = \frac{\partial c}{\partial x}(x,t)\mid_{x=b}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

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

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

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,

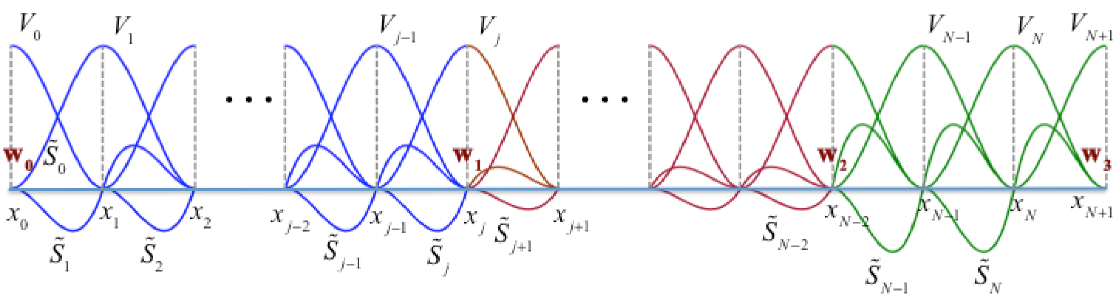
$$u(x_j, t) = a_{2j}(t), \tag{53}$$

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

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
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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

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

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:

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

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:

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

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

όπου οι $(2N+2) \times (2N+2)$ πίνακες C_m ορίζονται στην (39), τα διανύσματα γ, $\boldsymbol{f_{1,2,3}}$ 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:

$$\boldsymbol{\alpha} = \left[\begin{array}{ccccc} \alpha_0(t) & \alpha_2(t) & \cdots & \alpha_{2N+1}(t) & \alpha_{2N+2}(t) \end{array} \right]^{\mathsf{T}}$$
$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \left[\begin{array}{ccccc} \dot{\alpha}_0(t) & \dot{\alpha}_2(t) & \cdots & \dot{\alpha}_{2N+1}(t) & \dot{\alpha}_{2N+2}(t) \end{array} \right]^{\mathsf{T}} .$$

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

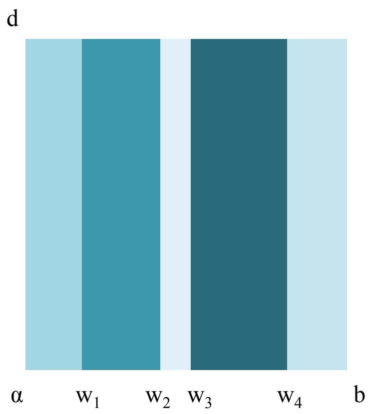
$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathcal{L}[c] + \mathcal{N}[c] \ , \ a < x < b \ , \ a < y < d \ , \ t \geq 0$$
$$c(x, y, 0) = c_0(x, y) \ , \ \frac{\partial c}{\partial \eta}(x, y, t) = 0$$

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

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

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 :

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

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).

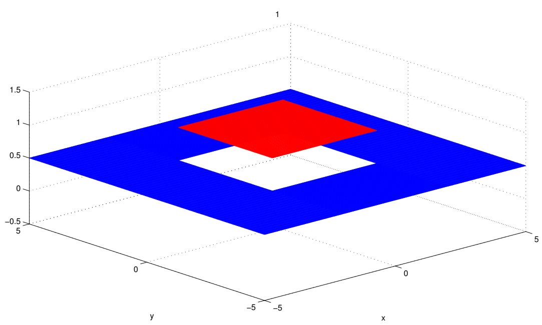
2.4 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με γωνιακές ασυνέχειες

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

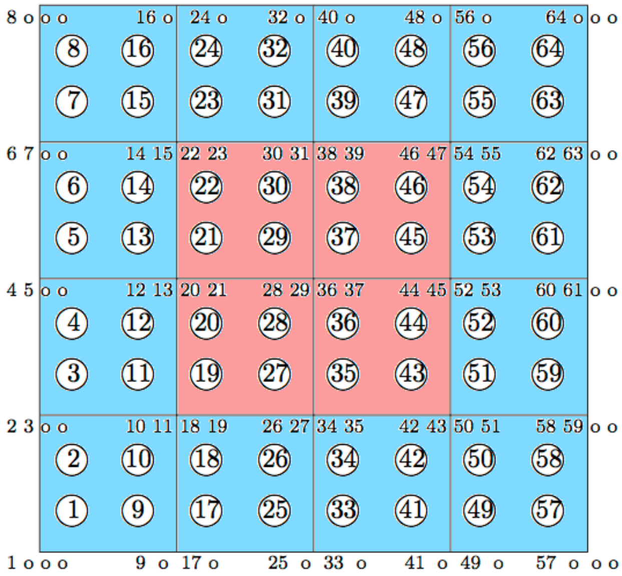
$$
D = \begin{cases} 1 & , \quad (x,y) \in \mathcal{W} = (w_1, w_2) \times (w_1, w_2) \\ \gamma & , \quad (x,y) \in \Omega \backslash \mathcal{W} \end{cases}
$$

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



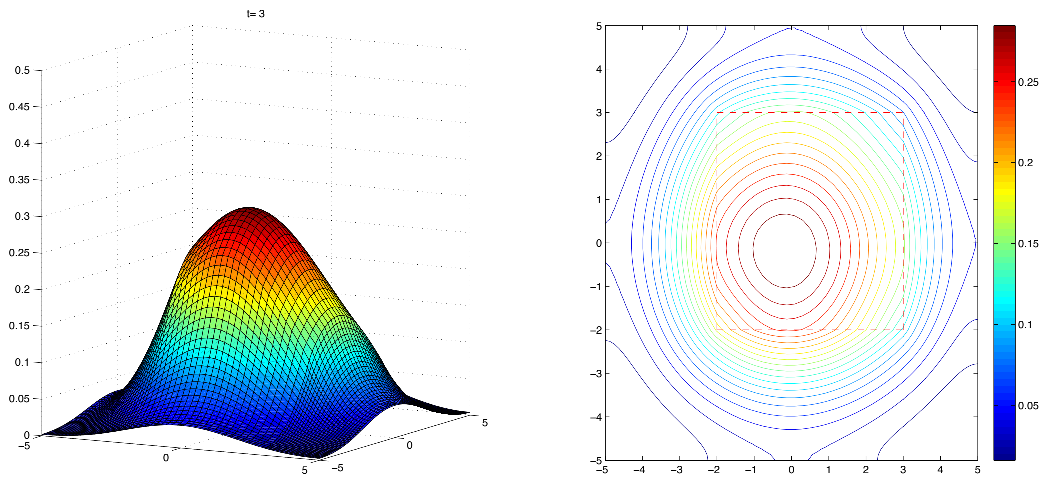
Σχήμα 14: Συντελεστής διάχυσης D με γωνιακές ασυνέχειες.

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.



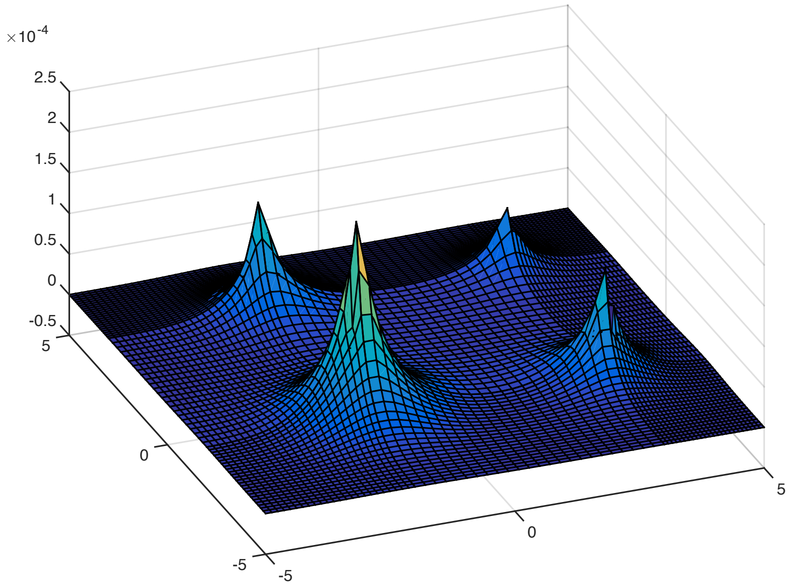
Σχήμα 15: Αρίθμηση αγνώστων και εξισώσεων για μία ενδεικτική διαμέριση.

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.

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

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 $k = 0, \dots$
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. $h_1 = \alpha_1 \left. u_1^{(2k+1)}\right|_{x=w} + (1-a_1) \left. u_2^{(2k+1)}\right|_{x=w}$, $h_2 = h_1$
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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

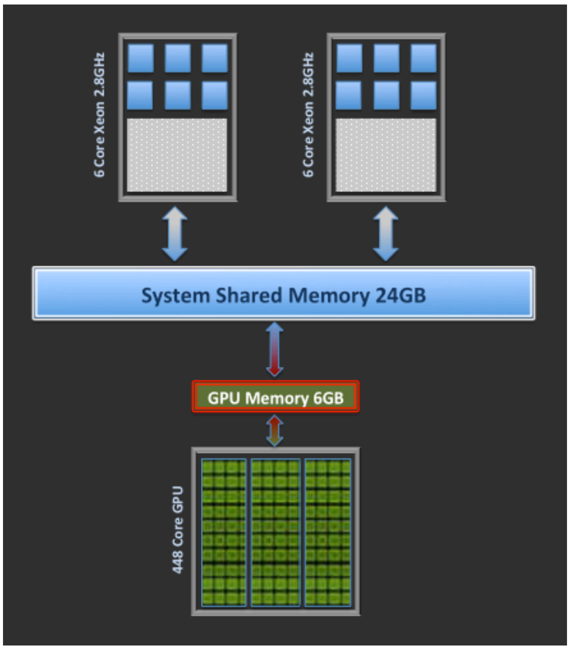
Υπολογισμός $\boldsymbol{a_{old}} = \boldsymbol{a_{new}}$

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.



Σχήμα 18: Αρχιτεκτονική κοινής μνήμης υπολογιστικού συστήματος CPU-GPU

Με βάση τις ανωτέρω αρχές ο αλγόριθμος παίρνει τη μορφή:

ΑΛΓΟΡΙΘΜΟΣ ΙΙ

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

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

Υπολογισμός σε GPU $\boldsymbol{a_0} = C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}_{old}$

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

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

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

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $C\,\boldsymbol{a_2} = \tilde{\boldsymbol{a}}_0$

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

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

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $C\,\boldsymbol{a_3} = \tilde{\boldsymbol{a}}_0$

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

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

Επίλυση με BiCGSTAB σε CPU/GPU $C_{\tilde{0}0}\,\boldsymbol{a}_{new} = \tilde{\boldsymbol{a}}_0$

Υπολογισμός σε GPU $\boldsymbol{a}_{old} = \boldsymbol{a}_{new}$

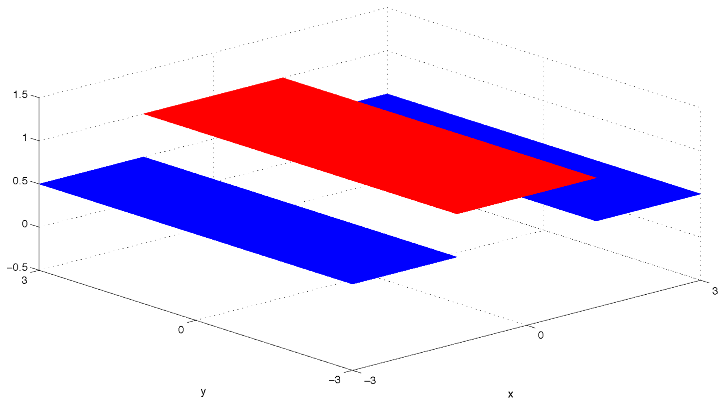
endfor

3 Αποτελέσματα

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

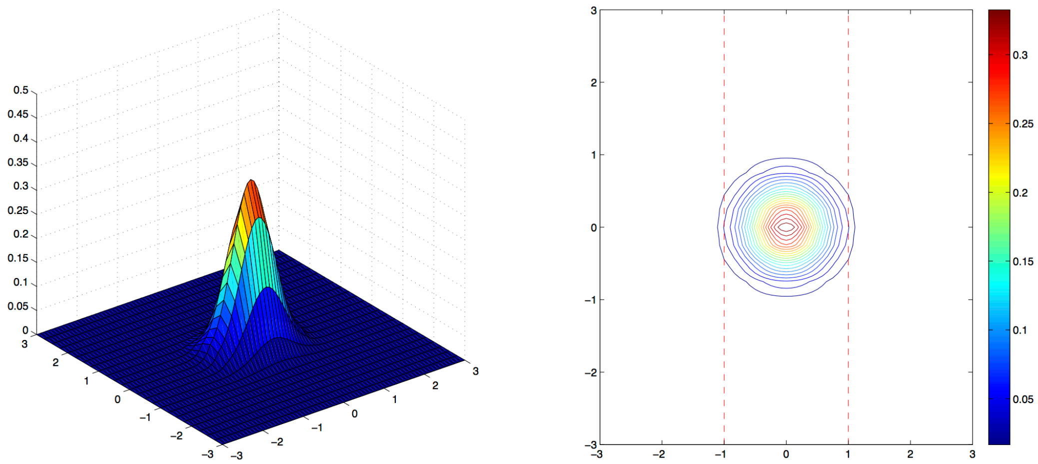
$$c_t = \nabla \cdot (D \nabla c) + c - c^2, \quad (x, y) \in (-3, 3) \times (-3, 3)$$

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:

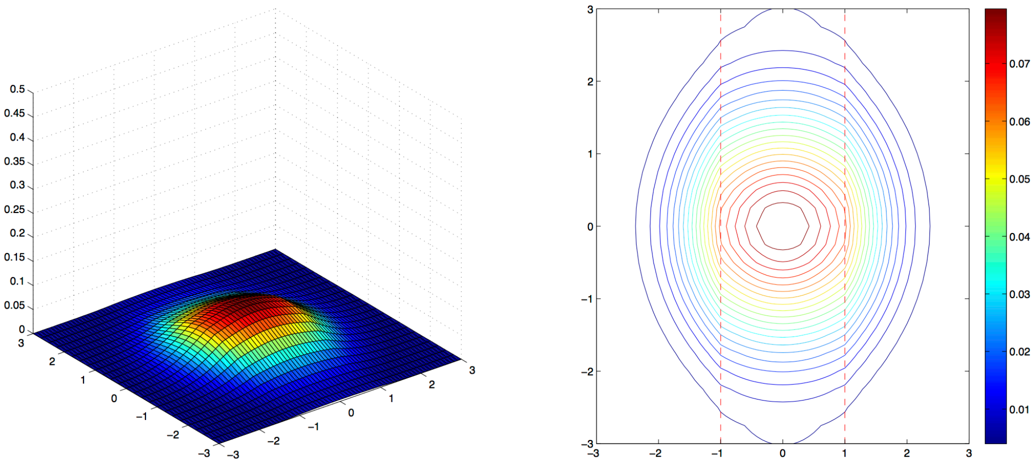
$$\mathcal{L}(\boldsymbol{a}) \equiv C_{\mathcal{L}}\boldsymbol{a} = \left[D_\gamma \left(C_{\tilde{2}0} + C_{\tilde{0}2}\right) + C_{\tilde{0}0}\right]\boldsymbol{a} \quad \text{και} \quad \mathcal{N}(\boldsymbol{a}) = -\left(C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}\right) \circ \left(C_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}\right).$$



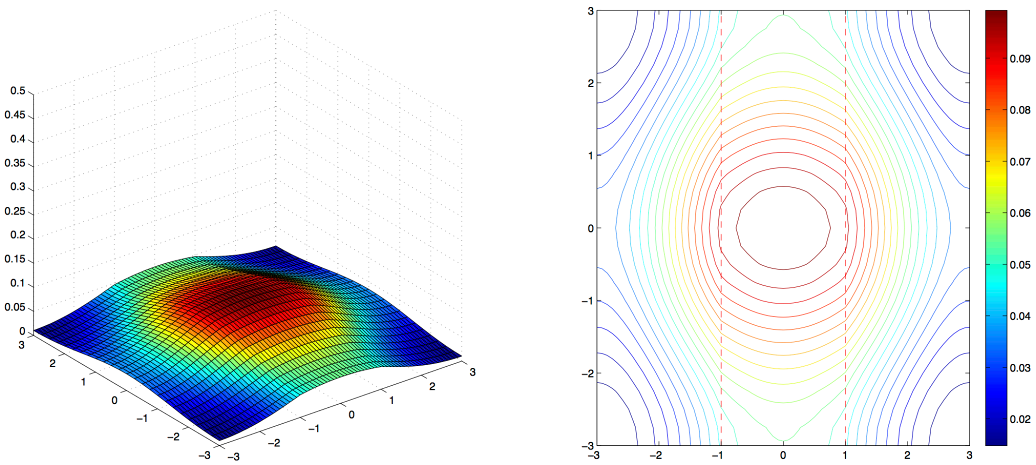
Σχήμα 19: Συγκέντρωση κυττάρων $c(x, y, t)$ κατά την 5η ημέρα

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

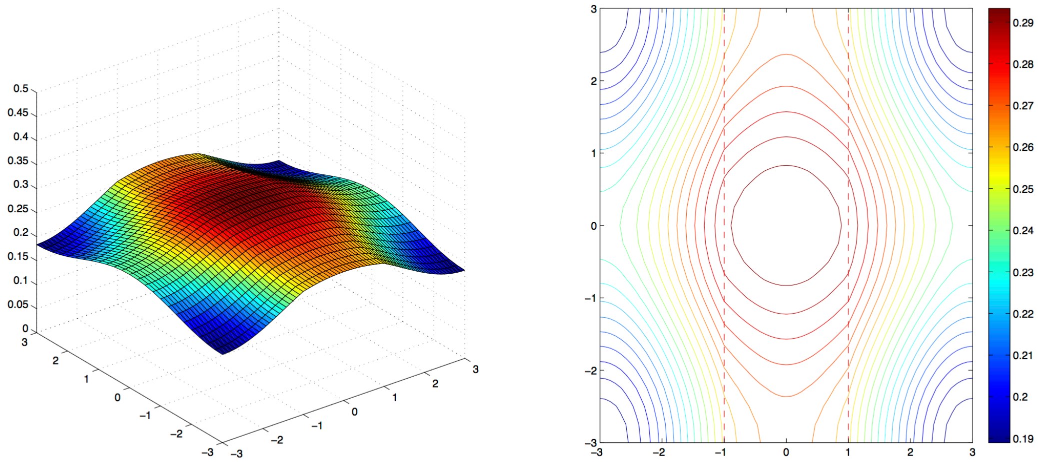
Στα σχήματα 19- 23 συνοψίζονται τα αποτελέσματα, από την εκτέλεση του Αλγορίθμου Ι της προηγούμενης παραγράφου, που αφορούν στη εξέλιξη στο χρόνο της συγκέντρωσης των καρκινικών κυττάρων αλλά και στη συμπεριφορά της dDHC μεθόδου.



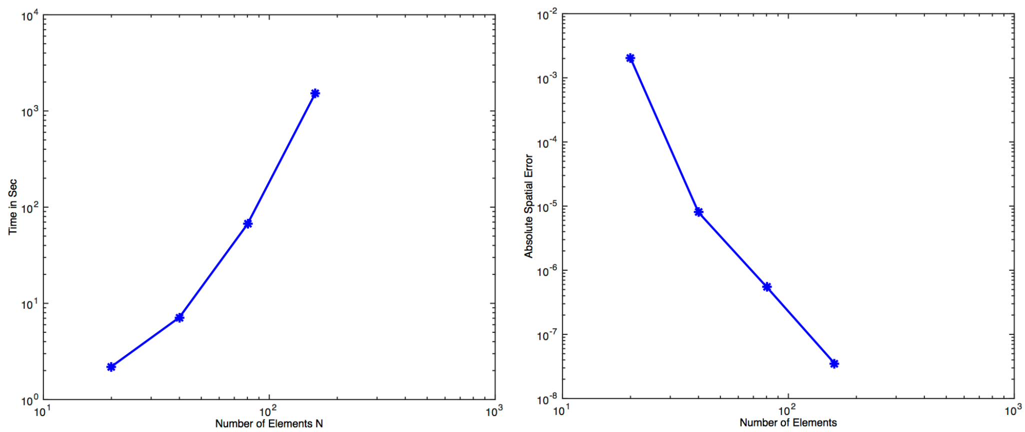
Σχήμα 20: Συγκέντρωση κυττάρων $c(x, y, t)$ κατά την 50η ημέρα



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



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-

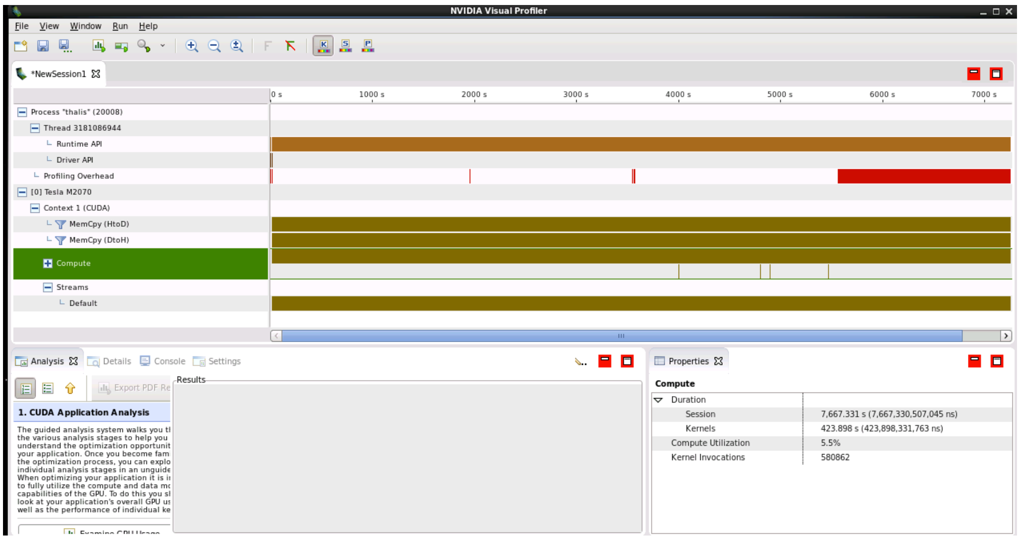
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και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

βλιοθήκη SPARSEKIT για τη διενέργεια αντίστοιχων υπολογισμών στον κεντρικό επεξεργαστή.

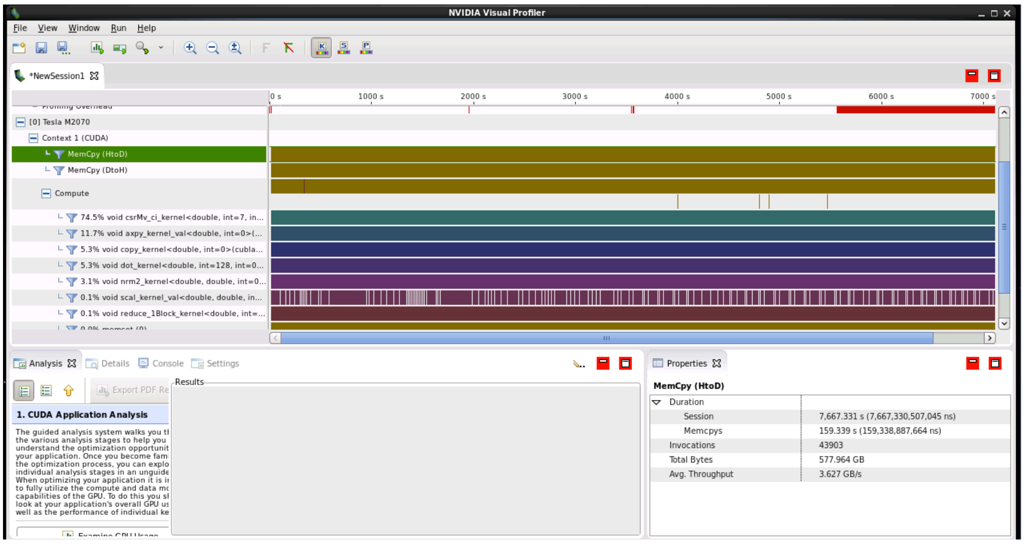
Ο πίνακας που ακολουθεί παρουσιάζει την επιτάχυνση η οποία επετεύχθη, συγκρίνοντας την επίλυση προβλήματος για την υλοποίηση με ένα νήμα εκτέλεσης σε σχέση με εκτελέσεις με χρήση πολλαπλών νημάτων του κεντρικού επεξεργαστή, καθώς και με την υλοποίηση με χρήση του επιταχυντή για πλήθος 40, 80, 160, 320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

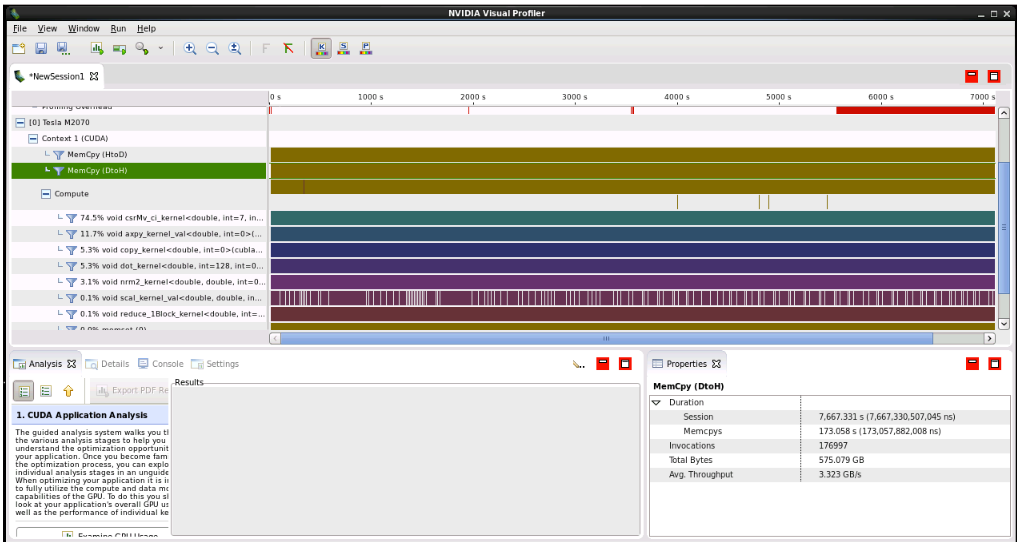
n	$dofs$	CPU1-CPU2	CPU1-CPU4	CPU1-CPU8	CPU-GPU
40x40	6400	1.18	1.36	2.18	1.08
80x80	25600	1.13	1.19	1.21	1.19
160x160	102400	1.01	1.08	1.05	1.13
320x320	409600	1.01	-	-	1.04
640x640	1638400	1.11	1.13	1.09	1.32

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.



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.

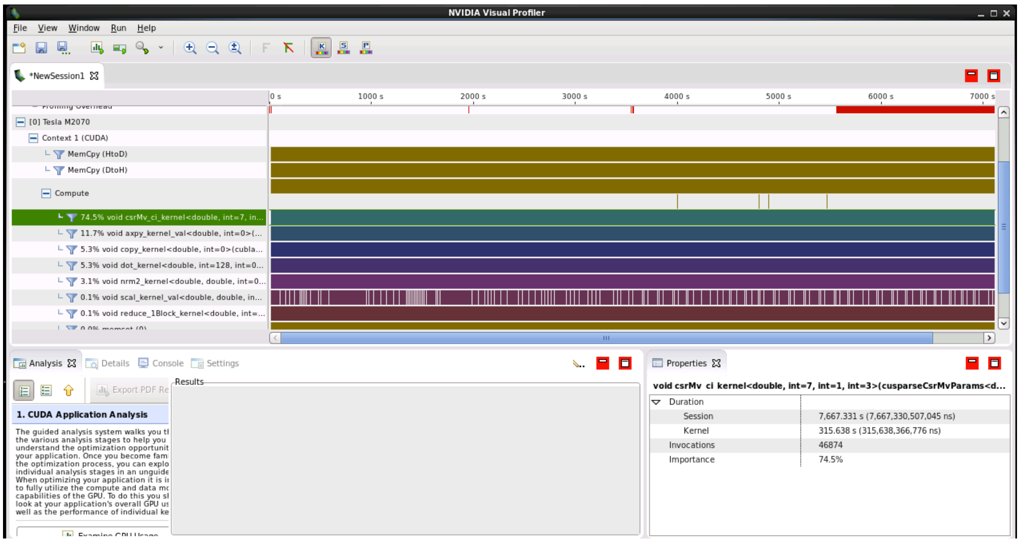




Η επόμενη εικόνα μας εμφανίζει το ποσοστό συμμετοχής κάθε διαδικασίας η οποία εκτελέστηκε στην κάρτα γραφικών. Όπως προκύπτει η διαδικασία πολλαπλασιασμού πίνακα σε αραιή μορφή αποθήκευσης με διάνυσμα κατανάλωσε το 74.5 επί τοις εκατό του χρόνου εκτέλεσης στον επιταχυντή. Ακολουθεί με 12 τοις εκατό περίπου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

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