

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

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 επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη κανονικά πεδία	9
2.4	Παράλληλοι Αλγόριθμοι 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

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 μη-κανονικά 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 επίπεδα του υλικού του υπολογιστή, από πολυ-επεξεργαστές υψηλών επιδόσεων (high speed multi-processors) και συστοιχίες υπολογιστών (clusters) έως 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



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 συνωριακών 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))

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

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

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

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 $k=1,2,\dots$ (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.

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 παραλληλίσμο, 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 υπόψη όλες τις $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}, \dots, u_{i-1}^{k+1}$ από την τρέχουσα επανάληψη και τις $u_{i+1}^k, \dots, u_n^k$ 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 $n = 1, \dots, N_t$
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-

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 Μέθοδοι 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:

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

$$L_i u_i = f_i \quad \Omega_i \quad i = 1, \dots, p, \quad (3)$$

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

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

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.

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 :

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

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

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

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 πηδήμα στη συνάρτηση/παράγωγο κλπ.).

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 επαλύθρευση 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 εφαρμόστηκε 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.

2.4 Παράλληλοι Αλγόριθμοι 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 ανομοιομορφων (ή μη) εργασιών που εκτελούνται ταυτόχρονα και επικοινωνούν μεταξύ τους συχνά (ανά επανά-

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 παραλληλισμότητα 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 προτείνουμε 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-

case	h	Ομοιόμορφο πρόβλημα			Μη-Ομοιόμορφο πρόβλημα		
		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 εξετάστηκαν με διαφορετικά βήματα διακριτοποίησης και μεγέθη πλέγματος των χωρίων για τα 3 χωρία των 2 προβλημάτων.

φορετικά χωρία που εμφανίζονται στο Σχήμα 1.

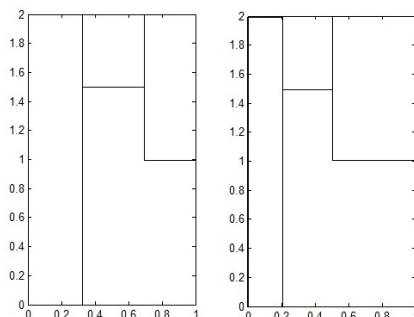
$$Lu(x, y) \equiv -\nabla u(x, y) + \gamma^2 u(x, y) = f(x, y), \quad (x, y) \in \Omega$$

$$u(x, y) = u^b(x, y), \quad (x, y) \in \partial\Omega$$

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

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

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 επιβεβαιώναν 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

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 έως 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.

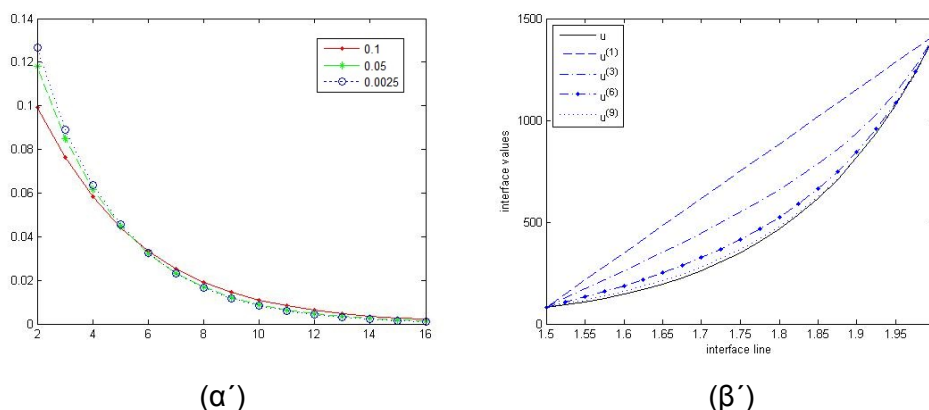
Στα πλαίσια εφαρμογής των ΜΧΔ σε προβλήματα εξέλιξης, θεωρήσαμε ένα μονοδιάστατο παραβολικό πρόβλημα πολλαπλών χωρίων το οποίο αποτελεί απλή προσομοίωση της συμπεριφοράς υγείων και καρκινικών κυττάρων στο εγκέφαλο. Το πρόβλημα περιγράφεται στο [3] και συνοψίζεται στη ΜΔΕ:

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

όπου

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

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



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 κατανεμημένο 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 παραλληλισμότητας 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

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 εκτελεσθεί 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 χρόνους 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.

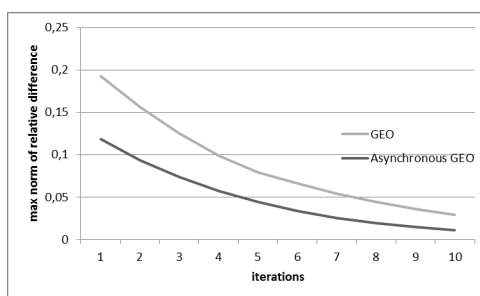
Η επιβάρυνση που προκαλεί η επικοινωνία, στην περίπτωση του κατανεμημένου περιβάλλοντος, δεν είναι σημαντική καθώς το μέγεθος των δεδομένων είναι κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερο από το πλήθος των δεδομένων που επεξεργάζονται οι διεργασίες που επιλύουν τις διαφορικές εξισώσεις. Για την περίπτωση του IRaaS, η επιβάρυνση από την επικοινωνία μεταξύ των επιμέρους εργασιών και τη διαχείριση 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 ορίστηκε 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 εκτελέστηκαν. 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.

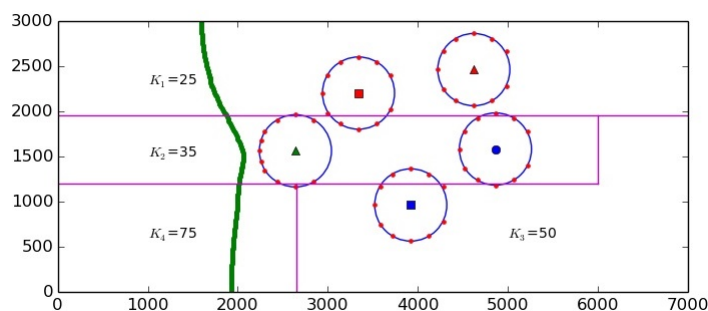
3.4 Έλεγχος και επαλήθευση των ΜΧΔ σε προβλήματα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου.

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

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

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



Σχήμα 4: Υδροφορέας στην Κάλυμνο.

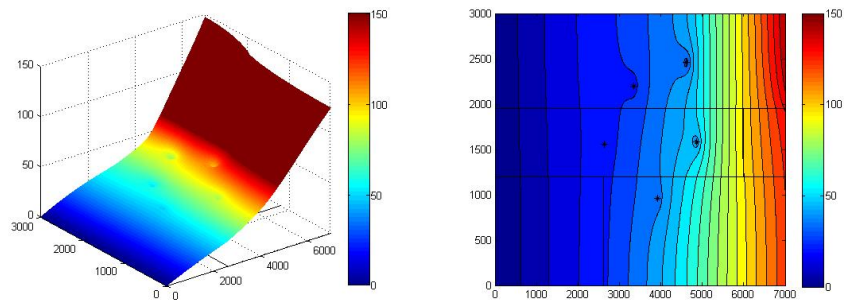
(δηλ. ο υδροφορέας της Καλύμνου) που απεικονίζεται στο Σχήμα 6. Στα σύνορα του σύνθετου προβλήματος οι συνθήκες είναι $\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = 0$ για τα σύνορα $y = 0$ και $y = 3000$ ενώ στο $x = 0, \phi = 0$ και για $x = 7000, \frac{\partial \phi}{\partial \eta} = 1,23$.

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 $\partial u / \partial \eta$ στις οριζόντιες διεπαφές είναι ίση με τη $\partial u / \partial y$ με πολύ μικρές, σχεδόν μηδενικές τιμές. Στις κάθετες διεπαφές η $\partial u / \partial \eta$ ταυτίζεται με τη $\partial u / \partial x$ η οποία έχει μεγαλύτερες τιμές και άρα μπορεί να συμβάλλει ουσιαστικότερα στη βελτίωση της τιμής μέσω από μια ΜΔΧ.

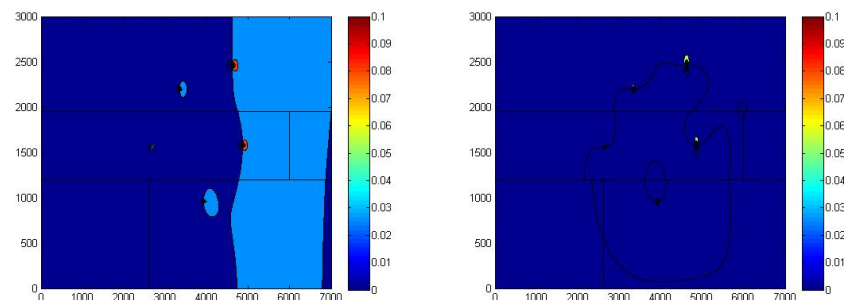
Χρησιμοποιήσαμε τη GEO και τη ROB για να λύσουμε το πρόβλημα των 5 χωρίων όπως αυτά περιγράφονται στο Σχήμα 6 και λαμβάνοντας υπόψιν μια ακόμη διεπαφή το ευθύγραμμο τμήμα $y = 1200, 6000 \leq x \leq 7000$ έτσι ώστε όλα τα επιμέρους χωρία να είναι ορθογώνια παραλληλόγραμμα.

Αρχικά χρησιμοποιήσαμε σαν αρχική συνθήκη πάνω στις διεπαφές τη συνάρτηση $u^{(0)} = 1/50 * x$, η οποία έχει $\partial u / \partial y = 0$, 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 :

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

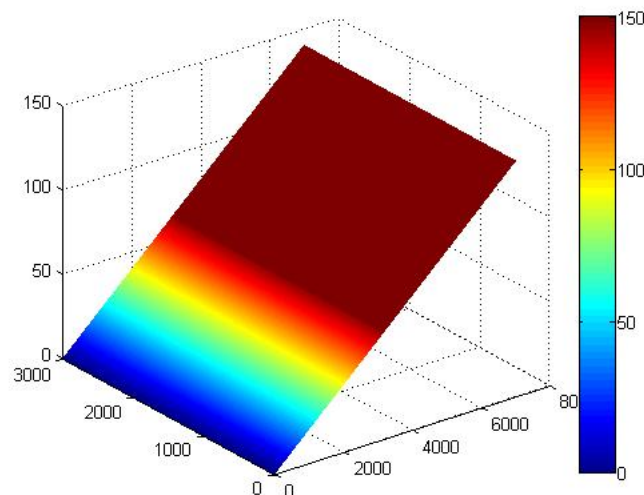


(α') 3D αναπαράσταση της λύσης. (β') Ισοϋψείς καμπύλες της λύσης.



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

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

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

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

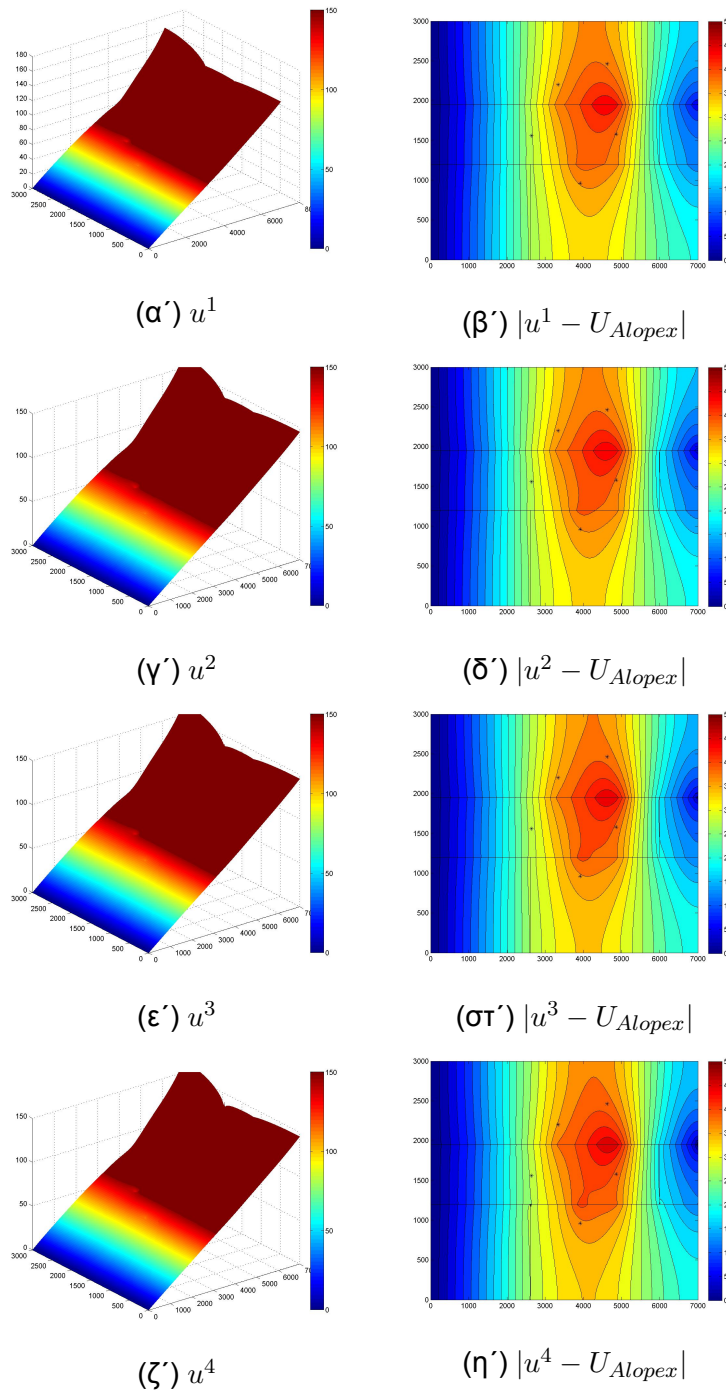
Παρατηρούμε ότι οι μεικτές συνθήκες της ROB ανάλογα με τις τιμές του λ έχουν συμπεριφορά τύπου Dirichlet, για μεγάλες τιμές του λ , ή τύπου Neumann για μικρές τιμές του λ αντίστοιχα. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα δοκιμάσαμε μεγάλες τιμές για το λ (π.χ., 5, 10, 50 κλπ.) και τα αποτελέσματα δεν ήταν ενθαρρυντικά, 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 μακριά 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.

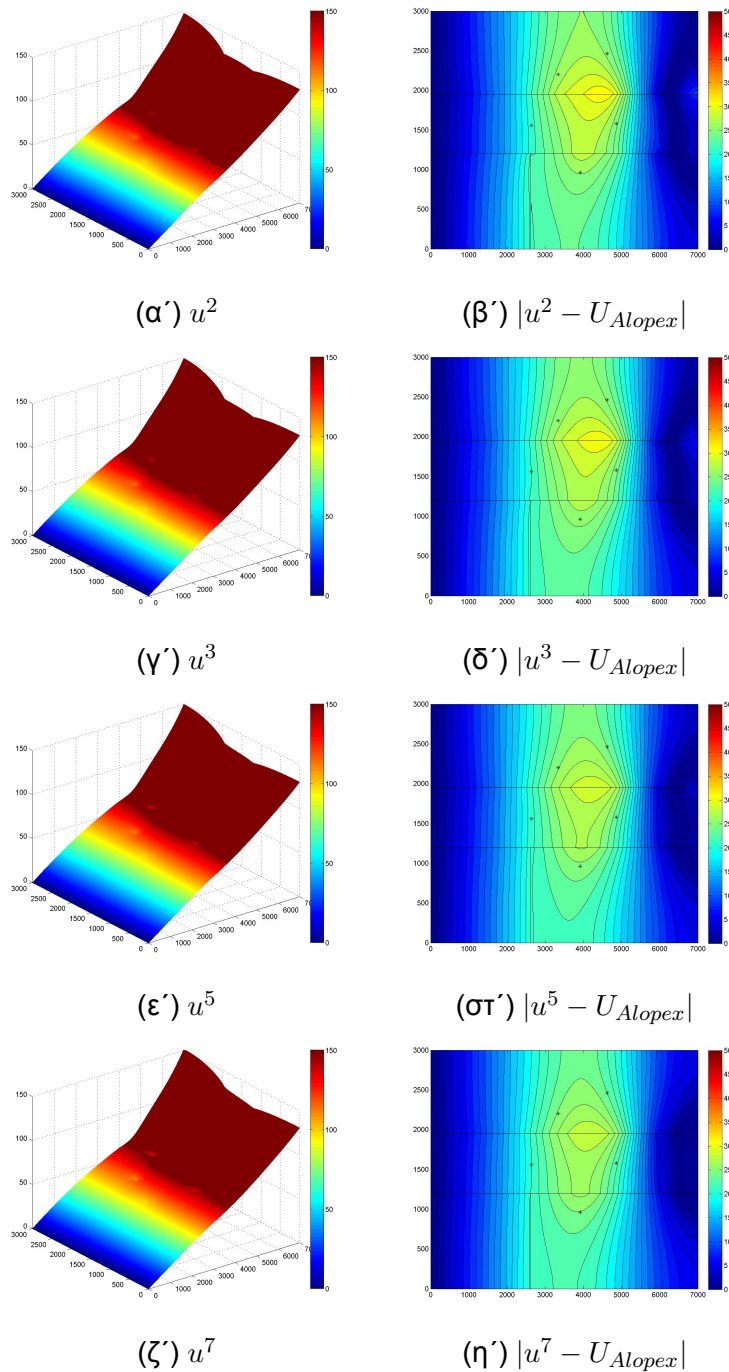
Επόμενο βήμα στους πειραματισμούς ήταν η αρχική συνθήκη να εξαρτάται από το y και άρα η $\theta u / \theta y$ να είναι διάφορη του 0, ώστε τόσο η διαφορική εξίσωση όσο και η ΜΧΔ να εντοπίσουν διαφορετικές τιμές και να προσπαθήσουν να τις διορθώσουν. Ορίσαμε ως αρχική συνθήκη την

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

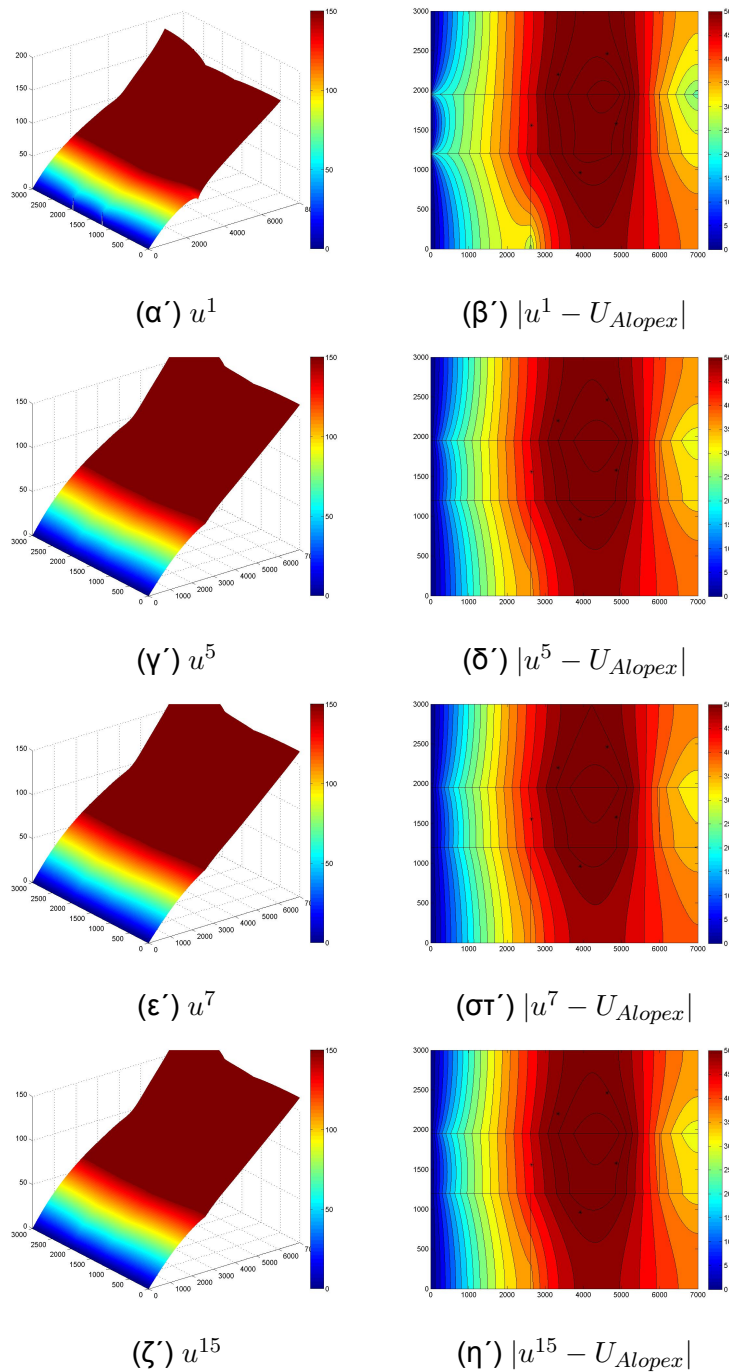
και τα πειραματικά αποτελέσματα αναπαριστώνται στο Σχήμα 9 με $\lambda = 1$ σε όλες τις διεπαφές. Στο Σχήμα 9 παρατηρούμε ότι η μη ομαλότητα στην πρώτη



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 ALOPES - FENICS (KEO1).



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).



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).

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 Conference on 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.
- 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



	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. Giannouloupoulos 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,

- 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.