

# Τελική Τεχνική Έκθεση

Έτος 2015



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

### Δράση 2.3

**ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ  
ΜΕΘΟΔΟΙ**



## Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Σκοπός</b>	<b>3</b>
1.1	Συνοπτική παρουσίαση . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Μεθοδολογία</b>	<b>4</b>
<b>3</b>	<b>Μαθηματικό Υπόβαθρο</b>	<b>7</b>
3.0.1	Λύτες Στοχαστικών/Ντετερμινιστικών ελλειπτικών ΜΔΕ. . . . .	7
3.0.2	Σχετικές μελέτες . . . . .	9
3.1	Υλοποίηση και χρήση . . . . .	10
3.2	Αριθμητικά πειράματα . . . . .	13
3.2.1	Πειράματα 2-διαστάσεων . . . . .	13
3.2.2	Πειράματα 3-διαστάσεων . . . . .	15
<b>4</b>	<b>Παραδοτέα</b>	<b>18</b>
<b>5</b>	<b>Συνεργασίες</b>	<b>18</b>
<b>6</b>	<b>Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις</b>	<b>20</b>

# 1 Σκοπός

## 1.1 Συνοπτική παρουσίαση

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

**Τίτλος** Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

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

**Παραδοτέα:**

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

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



Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης περιλαμβάνει τις συνολικές δράσεις και αποτελέσματα της δράσης και είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε το κύριο υπόβαθρο και τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 το μαθηματικό υπόβαθρο και το σχετικό γενικό αλγόριθμο για το δικό μας στοχαστικό / ντετερμινιστικό πλαίσιο επίλυσης και το σύστημά μας και σχολιάζουμε εν συντομία τα χαρακτηριστικά τους. Τα ζητήματα εφαρμογής εξετάζονται στην υπο-ενότητα 3.1 τα οποία συνδυάζονται με τις λεπτομέρειες εγκατάστασης και χρήσης. Μια περίληψη των αριθμητικών πειραμάτων που πραγματοποιήθηκαν μπορούν να βρεθούν στην ενότητα 3.2.

Αναλυτική αναφορά στα παραδοτέα και στις συνεργασίες που αναπτύχθηκαν θα βρείτε στις παραγράφους 4 και 5 αντίστοιχα. Τα μελλοντικά επιστημονικά μας πλάνα παρουσιάζονται στην παράγραφο 6.

## 2 Μεθοδολογία

Στην παρούσα παράγραφο παρουσιάζουμε μια επισκόπηση των υφιστάμενων προσεγγίσεων για την αριθμητική επίλυση γραμμικών ελλειπτικών ΜΔΕ χρησιμοποιώντας μεθόδους βασισμένες στην μεθοδολογία Μόντε Κάρλο.

Στην αναφερόμενη δράση μελετούμε στοχαστικούς αριθμητικούς λύτες για ντετερμινιστικά ελλειπτικά προβλήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ). Έχουμε επικεντρωθεί σε εκείνους που χαρακτηρίζονται από την multi-domain ή/και την multi-physics φύση τους. Ειδικότερα, μελετούμε είτε μεθόδους απλού τυχαίου περιπάτου σε σφαίρες ή συνέργειες των συμβατικών μεθόδων επίλυσης ντετερμινιστικών ΜΔΕ προβλημάτων και των παραδοσιακών πιθανολογικών Μόντε Κάρλο προσεγγίσεων. Οι βασικοί μας στόχοι είναι δύο. Ο πρώτος είναι να προσδιοριστεί με σαφήνεια το πλαίσιο και η πρακτική προσέγγιση όσον αφορά τη χρήση των ντετερμινιστικών συστατικών που οδηγούν σε αποτελεσματικούς αριθμητικούς λύτες για γραμμικές ντετερμινιστικές ΜΔΕ. Ο άλλος είναι ο σχεδιασμός και η υλοποίηση μίας απόδειξης λειτουργίας ενός υπολογιστικού πλαισίου που επιτρέπει τον πειραματισμό προκειμένου να διευκρινίσει τις δυνατότητες και τον προσδιορισμό των αναδυόμενων υπολογιστικών χαρακτηριστικών των προτεινόμενων προσεγγίσεων. Μια κατηγορία προβλημάτων σε δύο και τρεις διαστάσεις του χώρου μελετούνται πρώτα και τα πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζονται και συζητούνται. Δύο επιπλέον προβλήματα παρουσιάζονται στη συνέχεια, που είναι σημαντικά από την άποψη της μηχανικής και συγχρόνως αποτελούν πρόκληση από τη μαθηματική και αριθμητική άποψη.

Η μέθοδος Μόντε Κάρλο έχει τη δυνατότητα να παρέχει κατά προσέγγιση λύσεις σε μια ποικιλία μαθηματικών προβλημάτων, όχι κατ'ανάγκη με πιθανο-



λογικό περιεχόμενο ή δομή, εκτελώντας στατιστικά δειγματοληπτικά πειράματα. Περίπου ένας αιώνας έχει περάσει από την ανακάλυψη των μεθόδων οι οποίες βασιζόμενες στην έννοια του Μόντε Κάρλο παρέχουν αριθμητικές προσεγγίσεις για προβλήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων. Αυτές οι μέθοδοι παράγουν τυχαίους αριθμούς και με την παρατήρηση ορισμένων χαρακτηριστικών τους και της συμπεριφοράς τους είναι ικανά να υπολογίσουν προσεγγίσεις των λύσεων. Συγκεκριμένα, ήταν ο [43] ο οποίος πρώτος μελέτησε τη σχέση μεταξύ των στοχαστικών διαδικασιών και των παραβολικών διαφορικών εξισώσεων και ακολούθησε ο [15] που προτείνει αριθμητικές διαδικασίες για Ελλειπτικές ΜΔΕ, ενώ [34] ήταν οι πρώτοι που προσδιόρισαν αυτήν τη στοχαστική προσέγγιση δίνοντάς της ένα όνομα που παραπέμπει στις εγκαταστάσεις τυχερών παιχνιδιών στην πόλη του Μόντε Κάρλο και προτείνεται ως γενικός όρος για αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιούν δειγματοληψία τυχαίων αριθμών.

Από τότε οι Monte Carlo μέθοδοι έχουν χρησιμοποιηθεί συχνά και στην πραγματικότητα σε μεγάλο βαθμό και εξακολουθούν να χρησιμοποιούνται για πολλά σημαντικά προβλήματα. Για παράδειγμα, το Υπουργείο Ενέργειας των ΗΠΑ ισχυρίστηκε ότι οι MC προσομοιώσεις σταθερά καταναλώνουν έως και το ήμισυ των κύκλων υψηλής απόδοσης τους από την δημιουργία των υπερ-υπολογιστικών τους εγκαταστάσεων. Παρ' όλα αυτά, δεν έχουν χρησιμοποιηθεί πολύ γραμμικές ΜΔΕ εφαρμογές. Γενικά θεωρούνται ως η έσχατη μέθοδος που είναι ιδανική είτε για προβλήματα υψηλών διαστάσεων είτε περίπλοκων γεωμετριών [31]. Είναι ενδιαφέρον να επισημάνουμε ότι αυτό που είπε ο Monte Carlo πρωτοπόρος Mark Kac *"Χρησιμοποιείτε τις MC μεθόδους, μέχρι να καταλάβετε το πρόβλημα"* πριν από μερικά χρόνια περιγράφει με ακρίβεια το πώς οι περισσότεροι από εμάς σήμερα βλέπουμε τις μεθόδους Monte Carlo.

Τα προβλήματα ΜΔΕ έχουν συσχετιστεί με την Monte Carlo με διάφορους τρόπους (βλ [27] για μια πρόσφατη έρευνα). Η διάσημη Feynman—Kac φόρμουλα για παράδειγμα, δημιουργεί μια ενδιαφέρουσα σύνδεση μεταξύ των ΜΔΕ και των στοχαστικών διαδικασιών. Η μέθοδος Monte Carlo υπήρξε, και σε μεγάλο βαθμό εξακολουθεί να παραμένει η μόνη επιλογή για τον υπολογισμό διαφόρων μη-γραμμικών προβλημάτων, ενώ έχει αναγνωριστεί ως μια καλή επιλογή για πολλά άλλα υπολογιστικά δύσκολα μη γραμμικά προβλήματα. Επιπλέον φαίνεται να είναι μια φυσική επιλογή για κάθε διαφορική εξίσωση στην οποία ένας ή περισσότεροι από τους όρους είναι μια στοχαστική διαδικασία, που οδηγεί σε μία λύση που είναι και αυτή μία στοχαστική διαδικασία. Αυτό απεικονίζεται σαφώς από την πληθώρα των πολύ πρόσφατων ερευνητικών προσπαθειών που βασίζονται στην Monte Carlo για την αριθμητική επίλυση αυτών των εξισώσεων που είναι κοινώς γνωστές ως στοχαστικές διαφορικές εξισώσεις (βλέπε για παράδειγμα [45, 7] για χρονικά εξαρτημένα προβλήματα και [9, 33, 45, 8, 54] για ελλειπτικά προβλήματα).

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, ακόμη και θεμελιώδεις γραμμικές ΜΔΕ συνδέονται



στενά με τη στοχαστικότητα. Για παράδειγμα, είναι γνωστό ότι η διάχυση είναι στην πραγματικότητα μια μορφή της κίνησης Brown σε μικροσκοπική κλίμακα. Αυτό έδωσε αρκετό κίνητρο για τις διάφορες προσπάθειες για την ανάπτυξη και την προώθηση αριθμητικών λυτών βασισμένων στην Monte Carlo για χρονικά εξαρτημένες ΜΔΕ (π.χ. [26, 14, 24, 20] και ιδίως [27]). Γραμμικά μη στοχαστικά ελλειπτικά προβλήματα οριακής τιμής είναι επίσης στενά συνδεδεμένα με την πιθανότητα (αυστηρή θεωρία μέτρου). Για παράδειγμα, τα ολοκληρώματα με αναφορά σε συγκεκριμένο μέτρο έχουν αναγνωριστεί ως λύσεις ορισμένων παραβολικών ή ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων [15]. Αξίζει να αναφέρουμε ότι υπάρχουν πολλές πρόσφατες ερευνητικές προσπάθειες που αφορούν πιθανολογικές ερμηνείες της αρμονικότητας και των θεμελιωδών Ελλειπτικών ΜΔΕ, χρησιμοποιώντας την κίνηση Brown και το στοχαστικό λογισμό (βλ. [42] και αναφορά σ' αυτό).

Στην εργασία αυτή περιορίζουμε την έρευνά μας στην αποτελεσματικότητα των μεθόδων Monte Carlo για την αριθμητική επίλυση γραμμικών Ελλειπτικών ΜΔΕ και επικεντρωνόμαστε στην εξίσωση Poisson. Πρέπει να τονιστεί ότι παρόλο που υπήρξε και υπάρχει προς το παρόν, σημαντική ερευνητική δραστηριότητα για το θέμα αυτό, οι προτεινόμενες μέθοδοι δεν έχουν προσελκύσει μέχρι στιγμής την αναμενόμενη προσοχή. Επιπλέον, μπορεί κανείς να βρει πολύ λίγα στοιχεία λογισμικού<sup>1</sup> που είναι διαθέσιμα στο κοινό και κατάλληλα για τη στήριξη του πειραματισμού που είναι απαραίτητος για την κατανόηση των χαρακτηριστικών και της ιδιοσυγκρασίας των προτεινόμενων μεθόδων και για να πεισθούν τόσο οι ερευνητές όσο και οι επαγγελματίες ότι μπορούν να χρησιμοποιηθούν αποτελεσματικά για προβλήματα του πραγματικού κόσμου, όπως για παράδειγμα αυτό που εξετάζεται στο [49].

Στην εργασία αυτή περιοριζόμαστε σε ορθογώνια πολλαπλών πεδίων δύο και τριών διαστάσεων και επικεντρωνόμαστε στην υλοποίηση ενός υπολογιστικού πλαισίου που επιτρέπει τον εύκολο πειραματισμό με υβριδικές μεθόδους που αποτελούνται κυρίως από ένα συνδυασμό δύο βημάτων:

- **Στοχαστική προεργασία:** Μία προσέγγιση περιπάτου σε σφαίρες που βασίζεται στην Monte Carlo, χρησιμοποιείται για τον διαχωρισμό του αρχικού προβλήματος ΜΔΕ σε ένα σύνολο ανεξάρτητων υπο-προβλημάτων ΜΔΕ.
- **Ντετερμινιστική επίλυση:** Γίνεται αριθμητική επίλυση του κάθε υπο-προβλήματος ανεξάρτητα μέσω επιλεγμένων συστημάτων πεπερασμένων στοιχείων.

<sup>1</sup>Αναζήτηση στην TOMS BibTeX βιβλιογραφία με την λέξη κλειδί "Μόντε Κάρλο" επιστρέφει μόλις 10 αποτελέσματα.



### 3 Μαθηματικό Υπόβαθρο

Το υβριδικό μοντέλο που βασίζεται σε στοχαστικές-ντετερμινιστικές μεθόδους Μόντε Κάρλο και δεν είναι νέο. Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, ο Courant [?] ήταν ο πρώτος που αναφέρει τη χρήση Στοχαστικών Μεθόδων για την επίλυση μη-στοχαστικών προβλημάτων. Παρ' όλα αυτά, ήταν Muller [39] ο οποίος βασιζόμενος στην τότε απόρρητη έρευνα του Metropolis [34] πρότεινε για πρώτη φορά ένα συγκεκριμένο αριθμητικό σχήμα. Το έργο του συνέχισαν άλλοι (για παράδειγμα [19] [47] και [46]).

Στις πρόσφατες προσπάθειες θα αναφέρουμε τις [53, 11, 16, 35, 36, 17] και ιδίως εκείνες της τελευταίας δεκαετίας [29, 32, 24, 21, 38, 37, 18, 40, 25, 13, 45, 50, 41, 51, 49, 52]. Η πρόσφατη αυτή εξαιρετική δουλειά έχει λάβει μέχρι στιγμής ελάχιστη προσοχή από την επιστημονική μας κοινότητα (π.χ. σύμφωνα με αναφορές στο Scopus.)

Αξίζει να αναφερθεί ότι (εκτός από λίγες εξαιρέσεις) το μεγαλύτερο μέρος της σχετικής εργασίας που αναφέραμε μέχρι τώρα δεν εστιάζει στην αποτελεσματική εφαρμογή των Monte Carlo λυτών γενικά και σε σύγχρονα συστήματα παράλληλης επεξεργασίας ειδικότερα. Είναι άξιο απορίας γιατί όλα αυτά τα διαθέσιμα πολυπύρρηνα συστήματα δεν έχουν προσελκύσει τις Monte Carlo μεθόδους τουλάχιστον όσο αναμενόταν <sup>2</sup>.

#### 3.0.1 Λύτες Στοχαστικών/Ντετερμινιστικών ελλειπτικών ΜΔΕ.

Θεωρούμε το ακόλουθο ελλειπτικό πρόβλημα οριακής τιμής

$$Lu(x) = f(x) \quad x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d, \quad (1)$$

$$Bu(x) = g(x) \quad x \in \partial\mathcal{D}, \quad (2)$$

όπου  $L$  είναι ένας ελλειπτικός διαφορικός τελεστής,  $B$  τελεστής ορίου και  $d \in \mathbb{N}$ .

Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες κανονικότητας του κλειστού συνόλου  $\mathcal{D}$ , των τελεστών  $L$  και  $B$  και των δοθέντων συναρτήσεων  $f(x)$  και  $g(x)$  ικανοποιούνται. Αυτές οι συνθήκες διασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης  $u(x)$  στο  $C_2(\mathcal{D} \cap \partial\mathcal{D})$  του προβλήματος (1)–(2). Επιπλέον, υποθέτουμε ότι το πεδίο  $\mathcal{D}$  αποτελείται από (ή μπορεί να διαιρεθεί σε)  $\mathcal{N}_{\mathcal{D}}$  υποπεδία, π.χ.

$$\mathcal{D} = \cup_{\mu=1}^{\mathcal{N}_{\mathcal{D}}} \mathcal{D}_{\mu} \quad (3)$$

και ότι  $L_{\mu}$  και  $f_{\mu}$  είναι περιορισμοί των  $L$  και  $f$  στο  $\mathcal{D}_{\mu}$  ενώ  $B_{\mu}$  και  $g_{\mu}$  είναι περιορισμοί των  $B$  και  $g$  στο  $\partial\mathcal{D}_{\mu} \cap \partial\mathcal{D}$ .

<sup>2</sup> url <http://www.oxford-man.ox.ac.uk/gpuss>



Ορίζουμε τελικά τη διεπαφή μεταξύ των δύο υποπεδίων  $\mathcal{D}_\mu$  και  $\mathcal{D}_\nu$  ως

$$\mathcal{I}_{\mu,\nu} = \partial\mathcal{D}_\mu \cap (\partial\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{D}_\nu) \subset \mathbb{R}^{d-1}, \quad \mu, \nu = 1, \dots, \mathcal{N}_\mathcal{D}. \quad (4)$$

Υποθέτοντας  $\mu \neq \nu$ . Προφανώς θεωρούμε μόνο τις διεπαφές για τις οποίες έχουμε ότι  $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \neq \emptyset$ .

**Data:**  $i_1, i_2, \dots, i_N$ : τα id των υποπεδίων στα οποία επιθυμούμε να υπολογίσουμε τη λύση.

**Result:**  $\tilde{u}_\mu, \mu = i_1, \dots, i_N$ : προσεγγίσεις των περιορισμών της ακριβής λύσης  $u$  στο υποπεδίο  $\mathcal{D}_\mu, \mu = i_1, \dots, i_N$ .

// PHASE I: E

;

**while**  $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \subset \cup_{j=1}^N \partial\mathcal{D}_{i_j}$  **do**

    Επιλογή σημείων ελέγχου  $x_i \in \mathcal{I}_{\mu,\nu}, i = 1, 2, \dots, M_{\mu,\nu}$ ;

    Εκτίμηση λύσης  $u$  στα σημεία ελέγχου  $x_i$  χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo;

    Υπολογισμός της παρεμβάλουσας  $u_{\mu,\nu}^I$  του  $u_{\mu,\nu}$  χρησιμοποιώντας τα σημεία ελέγχου  $x_i$ ;

**end**

// PHASE II: E

;

**for**  $j = 1, 2, \dots, N$  **do**

    Λύση του προβλήματος ΜΔΕ::

$L_{i_j} u_{i_j}(x) = f_{i_j}(x) \quad x \in \mathcal{D}_{i_j}$  ;

$B_{i_j} u_{i_j}(x) = g_{i_j}(x) \quad x \in \partial\mathcal{D}_{i_j} \cap \partial\mathcal{D}$  ;

$L_{i_j} u_{i_j}(x) = h_{i_j}(x) \quad x \in \mathcal{D}_{i_j}$  ; //  $h_{i_j}(x)$

$u_{\mu,\nu}^I$

**end**

**Algorithm 1:** The Generic Algorithm.

Είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι η ανωτέρω γενική μεθοδολογία που γίνεται ιδιαίτερα ελκυστική σε πολλές μορφές του πραγματικού κόσμου, για παράδειγμα, όταν οι περιορισμοί του ελλειπτικού τελεστή  $L$  δεν είναι οι ίδιοι σε όλα τα υποπεδία, όταν υπάρχουν ιδιόμορφα σημεία σε ορισμένους υποτομείς, όταν ο τομέας PDE  $\Omega$  είναι πολύπλοκος και μπορεί να απλοποιηθεί αν αποσυντεθεί σε υποτομείς Idots. Σε τέτοιες περιπτώσεις, είναι πολύ σημαντικό ότι ένας επιλέγει την πιο πρόσφορη τοπική λύσης προσαρμοσμένη σε κάθε συγκεκριμένο υποπεδίο και τους περιορισμούς των τελεστών και των λειτουργιών σε αυτό. Επιπλέον, ο παραπάνω σχεδιασμός μας προσφέρει τη δυνατότητα να υπολογίσουμε τη λύση μόνο σε επιλεγμένους υποτομείς που έχουν ιδιαίτερη σημασία για εμάς.





### 3.0.2 Σχετικές μελέτες

Οι στοχαστικές-ντετερμινιστικές υβριδικές μέθοδοι βασισμένες στη Μοντέλο Κάρλο δεν είναι κάτι νέο. Η πρωτότυπη ιδέα βρίσκεται στο [39]. Για τις μη-στοχαστικές γραμμικές ΜΔΕ όμως, ήταν μόνο πολύ πρόσφατα που προτάθηκαν τέτοιες μέθοδοι. Από όσο που μπορούμε να ξέρουμε, η ιδέα εμφανίστηκε για πρώτη φορά στο [22, 1] και μελετήθηκε επιπλέον στα [1, 2, 3, 5, 6, 4]. Στοιχεία του αλγορίθμου που περιγράφηκε παραπάνω έχουν εξεταστεί προηγουμένως. Συγκεκριμένα, ... Παρόμοια με τη δική μας δουλειά " A Hybrid Stochastic/Deterministic Method See PDE model (and beyond)" από διαφάνειες διαλέξεων του Mascari

$$Lu \equiv -u''(x) = f(x), \quad x \in \Omega \equiv [a, b] \quad (5)$$

with  $a, b, \gamma \in R$ , υπό τους ακόλουθους περιορισμούς ορίων

$$Bu(x) = g(x), \quad x \in \partial\Omega \equiv [a, b] \quad (6)$$

τα οποία, για την απλότητα στην παρουσίαση της μεθόδου θεωρούνται ότι είναι Dirichlet.

Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες κανονικότητας για την κλειστή περιοχή  $\Omega$  και οι δεδομένες συναρτήσεις  $b(x)$ ,  $c(x) \leq 0$ ,  $\varphi(x)$  και  $\psi(x)$  ικανοποιούνται. Αυτές οι συνθήκες που διασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης  $u(x)$  στο  $C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$  του προβλήματος (1),

Υποθέτοντας ότι  $\Omega$  αποσυντίθεται σε  $p$  μη επικαλυπτόμενα υποπεδία  $\Omega_i \equiv [x_{i-1}, x_i]$ ,  $i = 1, \dots, p$  με  $x_0 = a$ ,  $x_p = b$  και  $x_{i-1} < x_i \in \Omega$  για  $i = 1, \dots, p-1$ . Δηλώνουμε το μέγεθος ενός υποπεδίου  $\Omega_i$  με  $\ell_i = x_i - x_{i-1}$  και τους περιορισμούς  $L$ ,  $f$  και  $\gamma$  στο  $\Omega_i$  από  $L_i$ ,  $f_i$ ,  $\gamma_i$ , αντίστοιχα. Επιπλέον υποθέτουμε ότι  $\gamma(x) = \gamma_i$  για  $x \in \Omega_i$ ,  $i = 1, \dots, p$ , όπου τα  $\gamma_i$ 's είναι πραγματικές σταθερές.

Η εφαρμογή μας μπορεί να λύσει την εξίσωση Poisson με συνοριακές συνθήκες Dirichlet. ([Σημείωση: Η ακόλουθη πρόταση είναι λάθος - είναι εκεί μόνο για να είναι υπό εξέταση] Τι περιορίζει αυτή τη μέθοδο για την επίλυση άλλων προβλημάτων πάρα πολύ, είναι η ανάγκη για τη λειτουργία του Green, που ταιριάζει στο πρόβλημα.)

Υποστηρίζει ένα αυθαίρετο αριθμό νημάτων. Για το multithreading χρησιμοποιούμε τη βιβλιοθήκη pthreads (σημείωση: έντυπο του προγράμματος επιτρέπει την εύκολη μετάβαση σε MPI).

Επιπλέον, οι τομείς που υποστηρίζονται είναι 2D και 3D υπερ-ορθογώνια. Εκείνοι μπορούν να αναλυθούν σε ένα  $M \times N$  αυθαίρετο πλέγμα μικρότερων υποτομέων (hyperrectangles).

Σε γενικές γραμμές, επιτυγχάνουμε την πιθανολογική αποσύνθεση τομέων ως εξής:

- **Υπολογισμός λύσης στα σημεία διεπαφής:** χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo που περιγράφεται στο [16] (υλοποιείται από εμάς - αυτό



το τμήμα μπορεί εύκολα να αποσπαστεί για να χρησιμοποιηθεί σε άλλες εφαρμογές), εκτιμούμε τις τοπικές λύσεις κατά μήκος των ορίων των νέων υποτομέων.

- **Λύσεις των διεπαφών:** παρεμβάλουμε τις εκτιμήσεις των τοπικών λύσεων (χρησιμοποιούμε την Sintef's Multilevel B-spline (MBA) [28] βιβλιοθήκη για το 3D και την Burkardt's splines βιβλιοθήκη για το 2D) και έτσι σχηματίζονται τα όρια των νέων υποπεδίων.
- **Υπολογισμός τοπικών λύσεων:** τώρα που τα όρια των υποπεδίων είναι γνωστά, λύνουμε το πρόβλημα για κάθε υποπεδίο χρησιμοποιώντας μία ντετερμινιστική μέθοδο. (Χρησιμοποιούμε την deal.II library).

### 3.1 Υλοποίηση και χρήση

Ξεκινάμε αυτή την ενότητα με την παρουσίαση της βασικής εφαρμογής<sup>3</sup> του αλγορίθμου που περιγράφεται παραπάνω.

Σημειώνουμε ότι η βασική υλοποίηση μπορεί να συνδυαστεί είτε με την CPU / GPU ή με τις υπηρεσίες web ή ένας συνδυασμός τους. Στο υπόλοιπο του παρόντος τμήματος για την απλότητα στην παρουσίαση, θα αναφερθούμε μόνον στην βασική υλοποίηση.

Αρχικά, ο χρήστης πρέπει να καθορίσει το πρόβλημα (προγραμματίζοντας τον στον πηγαίο κώδικα), π.χ, τη δεξιά πλευρά της Poisson εξίσωσης και των συνοριακών συνθηκών, το χωρίο, και τον επιθυμητό διαχωρισμό του χώρου (που χρησιμοποιείται για την παραλληλοποίηση).

Στη συνέχεια, ο χρήστης πρέπει να καθορίσει την ανάλυση των εκτιμήσεων Μόντε Κάρλο, δηλαδή, τον αριθμό των σημείων κατά μήκος μιας διεπαφής μεταξύ δύο υποτομέων όπου ο λύτης πρέπει να εκτιμήσει τη λύση χρησιμοποιώντας τη μέθοδο του περιπάτου σε σφαίρες, τον αριθμό των (ανεξάρτητων) περιπάτων που θα χρησιμοποιηθούν και, τελικά, το μέσο όρο, έτσι ώστε να γίνει μια εκτίμηση, και το όριο ανοχής, δηλαδή την απόσταση που σηματοδοτεί αν ένα σημείο είναι αρκετά κοντά στο όριο έτσι ώστε ο λύτης να μπορεί να υποθέσει ότι η τιμή της λύσης επί του σημείου αυτού είναι η ίδια με εκείνη στο όριο.

Ο λύτης τρέχει παράλληλα τους υπολογισμούς για κάθε ένα από τα σημεία της διασύνδεσης.<sup>4</sup> Η υλοποίησή μας βασίζεται στη μέθοδο περιπάτων σε σφαίρες [16]. Ας πούμε, ότι θέλουμε να εκτιμήσουμε το  $u(x_0)$ . Εάν  $s$  είναι η τρέχουσα εκτίμηση της λύσης,  $B(x)$  είναι η μεγαλύτερη σφαίρα του τομέα εστιασμένη στο

<sup>3</sup>Περισσότερες πληροφορίες στο <https://github.com/mvavalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers>.

<sup>4</sup>Θα μπορούσαμε να παραλληλίσουμε περαιτέρω εκτελώντας όλους τους περιπάτους παράλληλα, όμως η επιτάχυνση δεν θα ήταν σημαντική, ειδικά αν λάβουμε υπόψη το κόστος υπολογισμού του λυτή των πεπερασμένων στοιχείων που πρόκειται να ακολουθήσουν.



σημείο  $x$ ,  $q(y)$  είναι η δεξιά πλευρά του προβλήματος, και  $a(d)$  είναι μια συνάρτηση που σχετίζεται με τη συνάρτηση του Green για τη λειτουργία του προβλήματος, που παίρνει ως είσοδο την ακτίνα του  $B(x)$ . Ένας περίπατος απαιτεί τους παρακάτω υπολογισμούς. βήμα i: ανάθεση το  $x_0$  στο  $x$ ; ανάθεση του 0 στο  $s$ ; βήμα ii: εάν  $x$  είναι αρκετά κοντά στα όρια, πήγαινε στο βήμα  $v$ ; βήμα iii: επίλεξε τυχαία ένα σημείο  $y$  μέσα στο  $B(x)$ , λαμβάνοντας υπόψη την πυκνότητα του  $B(x)$  (περισσότερα σε αυτό στη συνέχεια); ανάθεση στο  $s$ , το άθροισμα της προηγούμενης τιμής του  $s$ , συν το γινόμενο του  $q(y)$  πολλαπλασιαζόμενο με  $a(d)$ ; βήμα iv: επίλεξε τυχαία ένα σημείο στην επιφάνεια του  $B(x)$ , ανάθεση του σημείου αυτού στο  $x$ ; πήγαινε στο βήμα ii; βήμα v: επιστροφή  $s$ ; Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται πολλές φορές, και ο μέσος όρος των εκτιμήσεων στο τέλος κάθε διαδικασίας χρησιμοποιείται ως τελική εκτίμηση.

Σημειώστε ότι το πρώτο βήμα, σε κάθε περίπατο επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας μία ημι-τυχαία ακολουθία (όχι εμφανής στον κώδικα στην Εικόνα ??). [εικασίες] το πρώτο βήμα επηρεάζει πολύ περισσότερο από ό, τι τα υπόλοιπα βήματα, την περιοχή όπου γίνεται ο περίπατος, ως εκ τούτου, χρησιμοποιώντας μία quasi-random ακολουθία για το πρώτο βήμα βοηθάει πολύ για να κάνουν μια πιο ομοιόμορφη δειγματοληψία, η οποία με τη σειρά του οδηγεί σε ταχύτερη σύγκλιση.

Ας εξετάσουμε τώρα πώς θα βρούμε τυχαία ένα σημείο  $y$  μέσα στο  $B(x)$ , σε σχέση με την πυκνότητα του  $B(x)$  (`rand_update_y(x, y, d)`).<sup>5</sup> Για να υπολογιστεί το νέο  $y$  πρέπει να υπολογιστεί μια νέα ακτίνα και τη γωνία του φορέα για να προστεθεί στο φορέα που αντιστοιχεί στο σημείο  $x$ .

Η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της ακτίνας και η γωνία είναι:  $\rho(r, \theta) = \frac{2r}{\pi d^2} \ln \frac{d}{r}$ , και επειδή είναι ανεξάρτητη από τη γωνία, μπορούμε να επιλέξουμε μια γωνία. Τώρα πρέπει να βρούμε μία νέα PDF (ας πούμε  $\rho(r)$ ) για την ακτίνα:  $\rho(r) = \int_0^{2\pi} \rho(r, \theta) d\theta = 2\pi \rho(r, \theta) = \frac{4r}{d^2} \ln \frac{d}{r}$

Μπορούμε να επιλέξουμε μια ακτίνα χρησιμοποιώντας τη λειτουργία quantile του  $\rho(r)$ , π.χ., η αντίστροφη αθροιστική συνάρτηση κατανομής του). Ωστόσο, δεν μπορούμε να υπολογίσουμε την quantile συνάρτηση αναλυτικά, ως εκ τούτου, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο απόρριψης [44].<sup>6</sup>

Σημειώστε ότι  $\max_x(PDF(x)) = 4/(e * d)^7$  Η μέθοδος απόρριψης θα λειτουργήσει ως εξής: βήμα i: ομοιόμορφη επιλογή ενός  $x_1$  μέσα στο  $(0, d)$ , και ένα τυχαίο  $x_2$  στο  $(0, 4/(e * d))$ . βήμα ii: έλεγχος εάν  $(x_1, x_2)$  είναι κάτω από την καμπύλη του PDF, το οποίο ισχύει εάν  $2 * \pi * \rho(x_1, \theta) < x_2$ . Εάν ισχύει, έχουμε

<sup>5</sup>Οι λεπτομέρειες αντιστοιχούν στην δισδιάστατη περίπτωση.

<sup>6</sup>[MATLAB script (to see the  $\rho(r)$ ): `d = 1; r = 0 : .001 : d; y = (4/d^2) * (r * log(d) - r * log(r)); plot(r, y);`] Η καμπανοειδής μορφή του  $\rho(r)$  σημαίνει ότι η μέθοδος απόρριψη πρόκειται να είναι αποτελεσματική

<sup>7</sup>Έχουμε  $(d/dx)(PDF(x)) = (4/d^2) * (lnd - lnr - 1) = 0 \Leftrightarrow lnr = lnd - lne \Leftrightarrow r = d/e$ , that is  $\max_x(PDF(x)) = \max(2 * \pi * \rho(r, \theta)) = 2 * \pi * \rho(d/e, \theta) = 4/(e * d)$ .



βρει την ακτίνα  $x_1$ , διαφορετικά πήγαινε στο βήμα  $i$ .

Χρησιμοποιούμε quasi μόνο μία φορά για τον παραλληλισμό, αλλά δείτε [30]. Αυτή κάλεσε επανεξέταση των παράλληλων μεθόδων Monte Carlo παρέχει μια επισκόπηση του θέματος και κάποια νέα αποτελέσματα για ενιαίο υπολογισμό ιδιοτιμής.

**Παρεμβολή** Υπάρχει μια σημαντική διαφορά στην εφαρμογή μας, όσον αφορά την παρεμβολή μεταξύ των περιπτώσεων των 2-διαστάσεων και των 3-διαστάσεων. Στην περίπτωση των τριών διαστάσεων χρειαζόμαστε παρεμβολή 2-διαστάσεων. Δεδομένου ότι η τελευταία είναι σχετικά περίπλοκη από την άποψη του υπολογισμού κάνουμε precompute των παρεμβολών και τις τροφοδοτούμε στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων. Χρησιμοποιούμε Πολυεπίπεδη B-splines Βιβλιοθήκη Sintef του (MBA<sup>8</sup>). Συγκεκριμένα χρησιμοποιούμε [28]. Εδώ, επίσης, οι υπολογισμοί για κάθε παρεμβάλουσα εκτελούνται παράλληλα.

Στην περίπτωση των δύο διαστάσεων οι υπολογισμοί είναι σχετικά απλοί και έχουμε επιλέξει να μην γίνεται προεπεξεργασία των παρεμβολών. Αντ' αυτού, έχουμε παράσχει στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων τις πληροφορίες που απαιτούνται για τον υπολογισμό των απαιτούμενων παρεμβολών επί τόπου. Για την παρεμβολή μίας διάστασης χρησιμοποιούμε την C++ βιβλιοθήκη John Burkardt της spline.

Σαφώς, και στις δύο περιπτώσεις, τα σημεία που χρησιμοποιούνται για την παρεμβολή είναι αυτό που υπολογίστηκε στο προηγούμενο βήμα της Μόντε Κάρλο εκτιμήςης.

**Πεπερασμένα Στοιχεία** Το τελικό βήμα της διαδικασίας είναι η λύση του κάθε υποπροβλήματος (που αντιστοιχεί σε κάθε υπο-περιοχή) χρησιμοποιώντας ένα λύτη πεπερασμένων στοιχείων. Σαφώς, οι υπολογισμοί για κάθε υπο-πρόβλημα εκτελούνται παράλληλα.

Χρησιμοποιούμε την C++ βιβλιοθήκη deal.II<sup>9</sup>. Αυτή η πρόσφατα αναπτυχθήσα βιβλιοθήκη και ήδη ευρέως χρησιμοποιούμενη βιβλιοθήκη [10] προσφέρει προσαρμοστικούς λύτες πεπερασμένων στοιχείων υψηλής ποιότητας για την αριθμητική επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων.<sup>10</sup>

<sup>8</sup><http://www.sintef.no/upload/IKT/9011/geometri/MBA/mba-1.1.tgz>

<sup>9</sup><http://www.dealii.org/>

<sup>10</sup>Η C++ κλάση μας LaplaceSolve βασίζεται στην κλάση LaplaceProblem, που υλοποιήθηκε στο 4ο βήμα του tutorial, στο documentation της έκδοσης 6.1.0 της βιβλιοθήκης.



## 3.2 Αριθμητικά πειράματα

### 3.2.1 Πειράματα 2-διαστάσεων

Ξεκινάμε με την εξέταση του ορθογώνιου χώρου  $\Omega \equiv [-1, 1] \times [-1, 1]$  της εξίσωσης Poisson

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad (7)$$

όπου

$$f(x, y) = (1 - \pi^2) (\sin(\pi x) \sinh(y) + 4 \cosh(2x) \cos(2\pi y)), \quad (8)$$

υπό τις ακόλουθες συνοριακές συνθήκες Dirichlet

$$\begin{aligned} u(\pm 1, y) &= \cosh(\pm 2) \cos(2\pi y) \\ u(x, \pm 1) &= \sin(\pi x) \sinh(\pm 1) + \cosh(2x), \end{aligned} \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega. \quad (9)$$

Η ακριβής λύση του παραπάνω προβλήματος δίνεται από

$$u(x, y) = \sin(\pi x) \sinh(y) + \cosh(2x) \cos(2\pi y). \quad (10)$$

και όπως απεικονίζεται στην εικόνα 3.2.1 έχει μάλλον έντονες διακυμάνσεις κατά μήκος και των δύο αξόνων που μας επιτρέπει να εξετάσουμε ποιοτικά την αποτελεσματικότητα του συστήματος μας. Για το σκοπό αυτό, θα αποσυντεθεί ο τομέας της ΜΔΕ  $\Omega$  σε οκτώ μη επικαλυπτόμενους υποτομείς που ορίζονται από τις γραμμές διασύνδεσης σε  $x_1 = 0$  and  $y_1 = -0.5$ ,  $y_2 = 0$  and  $y_3 = 0.75$ , λύνουμε τα υπο-προβλήματα ΜΔΕ που ορίζονται από τους υποτομείς  $\Omega_{1,0}$ ,  $\Omega_{0,1}$  και  $\Omega_{2,1}$  και σχεδιάζουμε τις λύσεις που υπολογίστηκαν...

Σημειώνουμε εδώ ότι εκτός από τις λειτουργίες που ορίζουν το πρόβλημα ΜΔΕ (τη δεξιά πλευρά του ελλειπτικού τελεστή και των οριακών συνθηκών, και ίσως την πραγματική λύση εάν αυτή είναι γνωστή), ο χρήστης πρέπει να δώσει άλλες παραμέτρους όπως αυτές απεικονίζονται στην λίστα που ακολουθεί 1 η οποία είναι σύμφωνη με μια γραφική διεπαφή χρήστη που αναπτύσσουμε. Η περιγραφή αυτής της διασύνδεσης είναι πέρα από το πεδίο εφαρμογής του παρόντος εγγράφου.

Listing 1: Listing of the configuration file for the 2D model problem.

```
# =====
# General Parameters
2 # Number of dimensions
4 # Maximum number of threads

1 # Dimension X length
1 # Dimension Y length
```



```

2 # Number of subdomains along dimension X
2 # Number of subdomains along dimension Y

# =====

# Monte Carlo Parameters
1000 # Number of walks
.0000000001 # Boundary tolerance

# =====

# Interpolation Parameters
3 # Number of nodes along dimension X
3 # Number of nodes along dimension Y

# =====

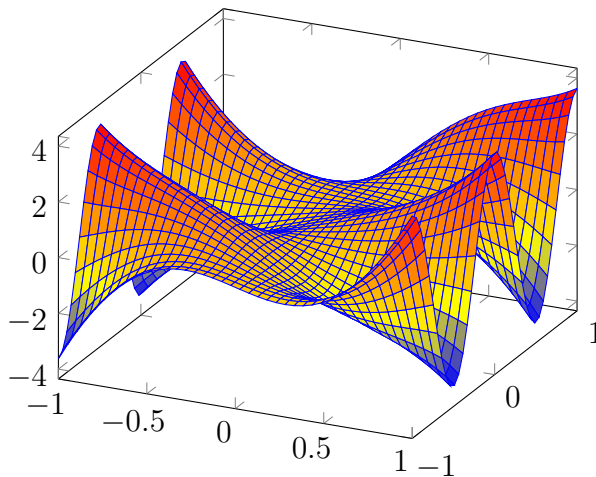
# Conjugate Gradient Parameters
6 # laplace grid refine times
# the parameters of solver_control()

```

Για την αριθμητική επίλυση των προαναφερθέντων υποπροβλήματα έχουμε βασισθεί σε μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων της βιβλιοθήκης deal.II με διαφορετικές στρατηγικές προσαρμογής βελτίωση ( $h$ ,  $h$  και  $hp$ ) βασιζόμενες σε δείκτες και λάθους με βάση τις τοπικές εκτιμήσεις σφάλματος. Στον Πίνακα 1 παρουσιάζονται τα εν λόγω διάφορα χαρακτηριστικά. Εικόνα 3.2.1 παρουσιάζει την ποιότητα της λύσης και την επίδραση του μηχανισμού βελτίωσης. Σας παρουσιάζουμε μόνο τα δεδομένα για συγκεκριμένα υπο-προβλήματα. Τα δεδομένα που σχετίζονται με τα υπόλοιπα είναι παρόμοια. Συγκεκριμένα, παρουσιάζονται στον  $y$ -άξονα την  $L_2$  νόρμα του σφάλματος και στον  $x$ -άξονα το επίπεδο της βελτίωσης.

Πίνακας 1: Τα αριθμητικά χαρακτηριστικά των αριθμητικών μεθόδων.

	cycle	0	1	2	3	4
	cells	4	16	64	256	1024
Q1 elements	dofs	9	25	81	289	1089
	CG iterations	1	6	23	51	103
Q2 elements	dofs	25	81	289	1089	4225
	CG iterations	7	31	70	142	286



Σχήμα 1: Πραγματική λύση του προβλήματος ΜΔΕ από(7)–(9).

### 3.2.2 Πειράματα 3-διαστάσεων

Εξετάζουμε το πρόβλημα ΜΔΕ που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα τροποποιώντας το ελαφρώς ως εξής.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = x + y + z \quad \forall (x, y) \in \Omega \equiv [-1, 1]^3, \quad (11)$$

υπό τις ακόλουθες συνοριακές συνθήκες Dirichlet

$$u(x, y, z) = g(x, y, z) \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega, \quad (12)$$

όπου η συνάρτηση της δεξιάς πλευράς  $g$  επιλέγεται με τέτοιο τρόπο ώστε η λύση του παραπάνω προβλήματος (11)–(12) να δίνεται από την εξίσωση

$$u(x, y, z) = \exp(\sqrt{2}\pi x) \sin(\pi(y + z)) + \frac{1}{6} (x^3 + y^3 + z^3). \quad (13)$$

και απεικονίζεται στην εικόνα 3.

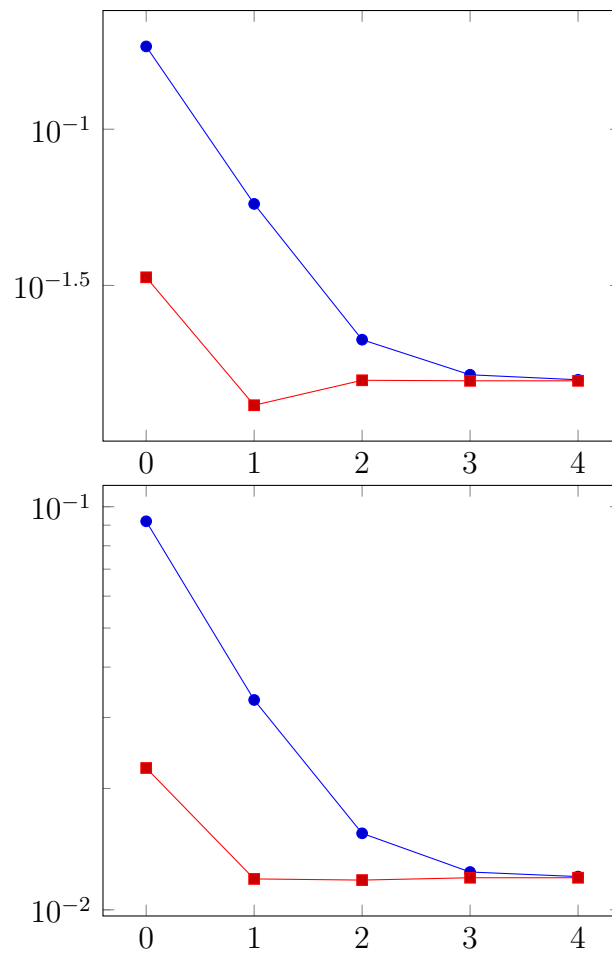
Εκτός από τις λειτουργίες που ορίζουν το ίδιο το πρόβλημα χρειαζόμαστε, όπως στην περίπτωση των 2 διαστάσεων να καθορίσουμε διάφορες παραμέτρους. Το σχετικό αρχείο ρυθμίσεων για το πείραμά μας δίνεται παρακάτω 2. Αξίζει να επισημανθεί η ομοιότητα των δύο αρχείων ρυθμίσεων για τις 2D και 3D περιπτώσεις (καταχωρίσεις 1 και 2 αντίστοιχα).

Η δόμηση του αρχείου ρυθμίσεων πρέπει να ακολουθεί τη δόμηση του gui.

Listing 2: Listing of the configuration file for the 3D model problem.

```
# =====
```





Σχήμα 2: L2 σφάλμα στο χωρίο  $\Omega_{0,1}$  σαν συνάρτηση του επιπέδου βελτίωσης για Q1 (άνω γράφημα) και Q2 κάτω γράφημα).



```

# General Parameters
3 # Number of dimensions
4 # Maximum number of threads

1 # Dimension X length
1 # Dimension Y length
1 # Dimension Z length

2 # Number of subdomains along dimension X
2 # Number of subdomains along dimension Y
2 # Number of subdomains along dimension Z

# =====

# Monte Carlo Parameters
1000 # Number of walks
.0000000001 # Boundary tolerance

# =====

# Interpolation Parameters
2 # Number of nodes along dimension Y
# (on the YZ planes)
2 # Number of nodes along dimension Z
# (on the YZ planes)

2 # Number of nodes along dimension X
# (on the XZ planes)
2 # Number of nodes along dimension Z
# (on the XZ planes)

2 # Number of nodes along dimension X
# (on the XY planes)
2 # Number of nodes along dimension Y
# (on the XY planes)

7 # Number of levels in the hierarchical
# construction (see MBA::MBAalg() of
# Multilevel B-spline (MBA) library)

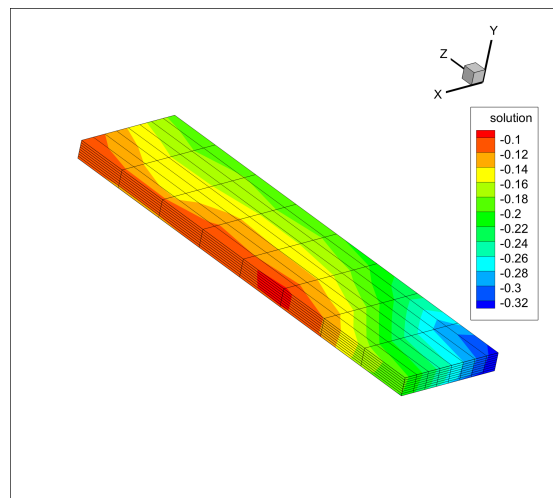
# =====

# Conjugate Gradient Parameters
6 # laplace grid refine times
# the params of solver_control()

```

Σε μια παρόμοια περίπτωση με αυτή των 2-διαστάσεων αποσυνθέτουμε τον τομέα  $\Omega$  σε 16 μη επικαλυπτόμενους υποτομείς που ορίζονται από τα επίπεδα





Σχήμα 3: Η υπολογισθήσα λύση του προβλήματος ΜΔΕ όπως αυτό ορίζεται στα (11)–(12).

interface  $x_1 = 0$  and  $y_1 = -0.5$ ,  $y_2 = 0$ ,  $y_3 = 0.75$  και  $z_1 = -0.2$ . ...

## 4 Παραδοτέα

**Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση** Το παρόν κείμενο.

**Παραδοτέο 2.3.2 Δημοσίευση τουλάχιστον τριών (3) επιστημονικών άρθρων σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά ή/και πρακτικά διεθνών συνεδρίων**

Οι δραστηριότητες της δράσης 2.3 έχουν παρουσιασθεί σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια και έχουν δημοσιευτεί σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά.

**Παραδοτέο 2.3.3 Λογισμικό** Βρίσκεται πρωτίστως στον ιστοχώρο <https://github.com/mvalalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers> και δευτερευόντως (υλοποίηση στην πλατφόρμα και παράλληλες υλοποιήσεις) στον ιστοχώρο [https://github.com/mvalalis/multidomain\\_multiphysics](https://github.com/mvalalis/multidomain_multiphysics) και έχει ήδη αξιοποιηθεί από τις ομάδες εργασίας του έργου και όχι μόνον.

## 5 Συνεργασίες



Στα πλαίσια των ερευνητικών μας δραστηριοτήτων της δράσης 2.3 μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας έχει σε ουσιαστικό επίπεδο συνεργαστεί ερευνητικά με μέλη

### Εσωτερικές συνεργασίες

- Πολύπλευρη συνεργασία με μέλη της ομάδας εργασίας του Πολυτεχνείου Κρήτης.
- Μονόπλευρη συνεργασία με μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Πάτρας.

**Εξωτερικές συνεργασίες** Με τους εξής συναδέλφους και τις αντίστοιχες επιστημονικές ομάδες:

- Γεώργιο Ζουράρη, Αναπληρωτή Καθηγητή του Τμήματος Μαθηματικών του Πανεπιστημίου Κρήτης τόσο δια ζώσης στο Ηράκλειο όσο και ηλεκτρονικά μέσω πολλών και εκτενών συνομιλιών (ηλ. ταχυδρομείο, τηλέφωνο και σκάιπ). Η συνεργασία αφορούσε, χωρίς να περιορίζεται, θέματα αξιολόγησης μοντελοποίησης με ΜΔΕ και ιδιαίτερα θέματα που άπτονται την σύγκλιση και την εκτίμηση σφάλματος κλασικών στοχαστικών αριθμητικών μεθόδων που βασίζονται σε τεχνικές Μόντε Κάρλο.
- Martin Simon καθηγητή του Johannes Gutenberg-Universität Mainz και Sylvain Maire καθηγητή του Université de Toulon, La Garde, τόσο δια ζώσης, κατά την διάρκεια του συνεδρίου Eleventh International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing, όσο και ηλεκτρονικά (ηλ. ταχυδρομείο) μέσω πολλών και εκτενών συνομιλιών. Η συνεργασία αφορούσε, χωρίς να περιορίζεται, θέματα ανάπτυξης μεθόδων τυχαίων περιπάτων σε σφαίρες για την αριθμητική επίλυση γενικών προβλημάτων γενικότερα αλλά και των δύο προβλημάτων μοντέλων (Διάδοση πρωτογενών καρκινικών όγκων εγκεφάλου (γλοίωμα/gliomas) και Υφαλμύριση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης) της δράσης 4.2 του έργου.

Θα πρέπει να σημειωθεί ότι η συνεργασία με τους παραπάνω αναφερόμενους εξωτερικούς συνεργάτες δεν έχουν προς το παρόν καταλήξει σε δημοσιεύσεις. Με βάση όμως τα προκαταρκτικά αποτελέσματά μας διαφαίνεται ότι σύντομα αυτά θα συγκεκριμενοποιηθούν σε σημαντικά ερευνητικά αποτελέσματα ιδιαίτερα αναφορικά με την εφαρμογή των μοντέλων Υφαλμύριση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης της δράσης 4.2?? του έργου.



## 6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

Είναι πεποίθησή μας ότι το προτεινόμενο και υλοποιημένο πλαίσιο προωθεί μια ενδιαφέρουσα νέα αντίληψη για την επίλυση ντετερμινιστικών ΜΔΕ και υποστηρίζει όχι μόνο τον πειραματισμό, αλλά έχει επίσης τη δυνατότητα να αποτελέσει ένα πρακτικό εργαλείο.

Στόχος μας είναι να αυξηθεί η διαίσθηση μας σχετικά με τον προτεινόμενο αλγόριθμο, και όχι να προσπαθήσουμε να δώσουμε νέα αποτελέσματα ή ακόμη και να παρέχουμε ένα υπολογιστικό εργαλείο για προβλήματα του πραγματικού κόσμου.

Μπορεί να επεκταθεί σε πιο γενικές χρήσεις [53] ενδεχομένως με ανωμαλίες [21] φορείς της ανώτερης τάξης [23, 13] αντιμετώπιση Neumann ή μικτές συνοριακές συνθήκες [48, 50, 51] μη ορθογώνιες περιοχές και σχεδόν σε κάθε πρόβλημα με τη γνωστή λειτουργία Green.

Η επέκταση της εργασίας μας σε προβλήματα εξαρτημένα από το χρόνο φαίνεται ότι δεν είναι δύσκολη. Η αισιοδοξία μας πηγάζει από σχετικές προσπάθειες που έχουν ήδη κάνει την εμφάνισή τους στη βιβλιογραφία (βλ [14, 49, 20]) ή άλλες που έχουν αρχίσει να αναδύονται [12].

Επιπλέον, η υλοποίηση Monte Carlo λυτών υψηλής απόδοσης στις σύγχρονες αρχιτεκτονικές και τις αναδυόμενες υπολογιστικές πλατφόρμες (π.χ. συστήματα πολλαπλών πυρήνων, GPUs και η συνεχής ροή των υπολογιστών έχει ήδη ξεκινήσει και παρουσιάζεται σε άλλες ενότητες του έργου.

## Αναφορές

- [1] J. Acebrón, M. Busico, P. Lanucara, and R. Spigler. Probabilistically induced domain decomposition methods for elliptic boundary-value problems. *Journal of Computational Physics*, 210(2):421–438, 2005.
- [2] J. Acebrón, M. Busico, P. Lanucara, and R. Spigler. Domain decomposition solution of elliptic boundary-value problems via Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 27(2):440–457, 2006.
- [3] J. Acebrón, R. Durán, R. Rico, and R. Spigler. A new domain decomposition approach suited for grid computing. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4699 LNCS:744–753, 2007.



- [4] J. Acebrón, A. Rodríguez-Rozas, and Spigler R. Domain decomposition solution of nonlinear two-dimensional parabolic problems by random trees. *Journal of Computational Physics*, 228(15):5574–5591, 2009.
- [5] J. Acebrón and J.A. Spigler. A fully scalable parallel algorithm for solving elliptic partial differential equations. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4641 LNCS:727–736, 2007.
- [6] J. Acebrón and R. Spigler. Scalability and performance analysis of a probabilistic domain decomposition method. *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 4967 LNCS:1257–1264, 2008.
- [7] C. Alves and A. Cruzeiro. Monte Carlo simulation of stochastic differential systems - a geometrical approach. *Stochastic Processes and their Applications*, 118(3):346–367, 2008.
- [8] I. Babuska, F. Nobile, and R. Tempone. A stochastic collocation method for elliptic partial differential equations with random input data. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 45(3):1005–1034, 2007.
- [9] I. Babuska, R. Tempone, and G. E. Zouraris. Solving elliptic boundary value problems with uncertain coefficients by the finite element method: The stochastic formulation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(12-16):1251–1294, 2005.
- [10] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II—A general-purpose object-oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4):24–??, 2007.
- [11] A. Bignami and E. Cupini. Monte Carlo method for finite difference equations of elliptic type in a multiregion domain. *J. Comput. Appl. Math.*, 8(2):87–92, 1982.
- [12] Alexander Bihlo, Ronald D. Haynes, and Emily J. Walsh. Stochastic domain decomposition for time dependent adaptive mesh generation. *J. Math. Study*, 48(2):106–124, 2015.
- [13] F. M. Buchmann and W. P. Petersen. An exit probability approach to solving high dimensional dirichlet problems. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 28(3):1153–1166, 2006.
- [14] J. Carlsson. A backward Monte Carlo method for solving parabolic partial differential equations. *arXiv:math/0010118v1*, 2000.



- [15] R. Courant, K. Friedrichs, and H. Lewy. Über die partiellen differenzengleichungen der mathematischen physik. *Mathematische Annalen*, 100:32–74, 1928.
- [16] J. M. DeLaurentis and L. A. Romero. A Monte Carlo method for Poisson's equation. *J. Comput. Phys.*, 90(1):123–140, 1990.
- [17] I. T. Dimov and T. V. Gurov. Estimates of the computational complexity of iterative Monte Carlo algorithm based on Green's function approach. *Mathematics and Computers in Simulation*, 47(2-5):183–199, 1998.
- [18] I. T. Dimov and R. Y. Papancheva. Green's function Monte Carlo algorithms for elliptic problems. *Mathematics and Computers in Simulation*, 63(6):587–604, 2003.
- [19] K. Edwards and A. Hogg. Methods of improving analogue Monte Carlo solutions of elliptic partial differential equations. 1:664–673, 1967.
- [20] R. Farnoosh and M. Ebrahimi. Monte Carlo method via a numerical algorithm to solve a parabolic problem. *Applied Mathematics and Computation*, 190(2):1593–1601, 2007.
- [21] J. Given and C. Hwang. Edge distribution method for solving elliptic boundary value problems with boundary singularities. *Physical Review E - Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 68(4 2):461281–461286, 2003.
- [22] E. Gobet and S. Maire. Sequential Monte Carlo domain decomposition for the Poisson equation. In *17th IMACS World Congress, Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation*, July 2005.
- [23] K. Gopalsamy and B. Aggarwala. Monte Carlo methods for some fourth order partial differential equations. *Z Angew Math Mech*, 50(12):759–767, 1970.
- [24] M. Griebel and M. A. Schweitzer. A particle-partition of unity method for the solution of elliptic, parabolic, and hyperbolic PDEs. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 22(3):853–890, 2001.
- [25] S. Heinrich. The randomized information complexity of elliptic PDE. *Journal of Complexity*, 22(2):220–249, 2006.
- [26] S. Hoshino and K. Ichida. Solution of partial differential equations by a modified random walk. *Numerische Mathematik*, 18(1):61–72, 1971.



- [27] B. Lapeyre, E. Pardoux, and R. Sentis. *Introduction to Monte Carlo Methods for Transport and Diffusion Equations*. Oxford University Press, 2003. Translated by A. Craig and F. Craig.
- [28] S. Lee, G. Wolberg, and S. Shin. Scattered data interpolation with multilevel B-splines. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 3(3):228–244, 1997. cited By (since 1996) 175.
- [29] R. N. Makarov. Solution of boundary value problems for nonlinear elliptic equations by the Monte Carlo method. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 14(5):453–467, 1999.
- [30] M. Mascagni. Deterministic Monte Carlo methods and parallelism. volume Sourcebook on Parallel Computing, pages 249–258, 2003.
- [31] M. Mascagni and C. Hwang.  $\epsilon$ -Shell error analysis for “Walk On Spheres” algorithms. *Mathematics and Computers in Simulation*, 63(2):93–104, 2003.
- [32] M. Mascagni, A. Karaivanova, and Y. Li. A quasi-Monte Carlo method for elliptic partial differential equations. *Monte Carlo Methods and Applications*, 7:283–294, 2001.
- [33] H. G. Matthies and A. Keese. Galerkin methods for linear and nonlinear elliptic stochastic partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(12-16):1295–1331, 2005.
- [34] N. Metropolis and S. Ulam. The Monte Carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44:335–341, 1949.
- [35] G. A. Mikhailov. Recurrent formulae and the Bellman principle in the Monte Carlo method. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 9(3):281–289, 1994.
- [36] G. A. Mikhailov. Solving the Dirichlet problem for nonlinear elliptic equations by the Monte Carlo method. *Siberian Mathematical Journal*, 35(5):967–975, 1994.
- [37] G. A. Mikhailov and V. L. Lukinov. Probability representations and the Monte Carlo method for solving equations with powers of elliptic operators. *Doklady Mathematics*, 67(3):423–425, 2003.
- [38] G. Milstein and M. Tretyakov. The simplest random walks for the Dirichlet problem. *Theory of Probability and its Applications*, 47(1):53–68, 2003.



- [39] M.E. Muller. Some continuous Monte Carlo methods for the Dirichlet problem. *The Annals of Mathematical Statistics*, 27(3):569–589, 1956.
- [40] R. J. Papancheva, I. T. Dimov, and T. V. Gurov. *A new class of grid-free Monte Carlo algorithms for elliptic boundary value problems*, volume 2542, pages 132–139. 2003.
- [41] R. Y. Papancheva. *Parallel realization of grid-free Monte Carlo algorithm for boundary value problems*, volume 3743 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 181–188. Springer, 2006.
- [42] N. Privault. Potential theory in classical probability. In U. Franz and M. Schurmann, editors, *Quantum Potential Theory*, volume 4310 of *Lecture Notes in Mathematics*, pages 3–59. Springer, 2008.
- [43] L.J.W.S. Rayleigh. On James Bernoulli's theorem in probabilities. *Philos. Mag.*, 47:246–251, 1899.
- [44] Christian P. Robert and George Casella. *Monte Carlo Statistical Methods*. Springer-Verlag New York, Inc., Secaucus, NJ, USA, 2005.
- [45] L. Roman and M. Sarkis. Stochastic Galerkin method for elliptic SPDEs: A white noise approach. *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, 6(4):941–955, 2006.
- [46] J. Sacadura and A. Al-Abed. Analysis of time-dependent cylindrical problems using Monte Carlo. *ASME, Transactions, Journal of Heat Transfer (ISSN 0022-1481)*, 105:931–933, 1983.
- [47] E. Sadeh and M.A. Franklin. Monte Carlo solution of partial differential equations by special purpose digital computer. *IEEE Transactions on Computers*, 23(4):389–397, 1974.
- [48] M. Sadiku and K. Gu. New Monte Carlo method for -Neumann problems. pages 92–95, 1996.
- [49] M.N.O. Sadiku, C.M. Akujobi, S.M. Musa, and S.R. Nelatury. Analysis of time-dependent cylindrical problems using Monte Carlo. *Microwave and Optical Technology Letters*, 49(10):2571–2573, 2007.
- [50] N. Simonov. Monte Carlo methods for solving elliptic equations with boundary conditions containing the normal derivative. *Doklady Mathematics*, 74(2):656–659, 2006.





- [51] N. Simonov. Random walks for solving boundary-value problems with flux conditions. volume 4310 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 181–188. Springer, 2007.
- [52] B. Vajargah and K. Vajargah. Monte Carlo method for finding the solution of Dirichlet partial differential equations. *Applied Mathematical Sciences*, 1(10):453–462, 2007.
- [53] J. Vrbik. Monte Carlo simulation of the general elliptic operator. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 20(3):2693–2697, 1987.
- [54] X. Wan and G. Karniadakis. Solving elliptic problems with non-Gaussian spatially-dependent random coefficients. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(21–26):1985–1995, 2009. Advances in Simulation-Based Engineering Sciences - Honoring J. Tinsley Oden.



Listing 3: Random walks on spheres implementation

```

/**
 * @nof_walks: this first argument of the function corresponds to the
 *             number of walks we are willing to make.
 * @x_start: this second argument is the point whereat we want the v
 *           alue of the solution function.
 * The algorithm estimates the value of the solution function at
 * @x_start by averaging the estimates of the @nof_walks different
 * walks on spheres.
 * Some additional functions are used in the following:
 *   calc_sphere_rad(x) returns the radius of the largest sphere, i
 *                       n the domain, that is centered at @x
 *   f(x) returns the value of the solution function on @x close
 *         to the boundary
 *   q(x) returns the value of the right hand side on @x
 */
double mc_estimate(int nof_walks, double *x_start)
{
    int i, j;
    double msol_est; //mean estimate of the solution

    msol_est = .0; //initialize msol_est
    for (i=0; i<nof_walks; i++) {
        double x[2]; //randomly chosen point on the boundary
                    //(random distribution: uniform)
        double y[2]; //randomly chosen point inside the sphere
                    //(random distribution: dictated by the Green function)
        double sol_est; //current estimate of the solution
        double d; //radius of the sphere at hand

        x[0] = x_start[0]; //initialize x
        x[1] = x_start[1];
        sol_est = .0; //initialize sol_est

        while ((d = calc_sphere_rad(x)) > btol) { //i.e., x is not
                                                // close to the boundary
            rand_update_y(x, y, d); //update y
            sol_est += (d*d/4.)*q(y);

            rand_update_x(x, d); //update x
        }

        sol_est += f(x);

        msol_est += sol_est/nof_walks;
    }

    return msol_est;
}

```