

Τελική Έκθεση Αξιολόγησης Έτος 2015



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 5

ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ



Πίνακας Περιεχομένων

1	ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΦΥΣΙΚΟΥ ΑΝΤΙΚΕΙΜΕΝΟΥ & ΑΝΑΛΥΣΗ ΠΕΠΡΑΓΜΕΝΩΝ	3
1.1	ΔΡΑΣΗ 1: ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ ΕΡΓΟΥ.....	3
1.2	ΔΡΑΣΗ 2.1: ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ/ΑΣΥΝΕΧΕΙΣ ΜΕΘΟΔΟΙ COLLOCATION	4
1.3	ΔΡΑΣΗ 2.2: ΜΕΘΟΔΟΙ ΧΑΛΑΡΩΣΗΣ ΣΤΙΣ ΔΙΕΠΑΦΕΣ - ΜΧΔ	6
1.4	ΔΡΑΣΗ 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ	8
1.5	ΔΡΑΣΗ 2.4: ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΦΩΚΑ.....	10
1.6	ΔΡΑΣΗ 3.1: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ CLUSTERS, GRIDS ΚΑΙ CLOUDS	12
1.7	ΔΡΑΣΗ 3.2: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES).....	15
1.8	ΔΡΑΣΗ 4.1: ΣΥΓΚΕΡΑΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ ..	17
1.9	ΔΡΑΣΗ 4.2: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ ..	19
1.10	ΔΡΑΣΗ 4.3: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ	21
1.11	ΔΡΑΣΗ 6: ΔΙΑΧΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	24
2	ΣΥΝΟΨΗ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ	27



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

1 Περιγραφή Φυσικού Αντικειμένου & Ανάλυση Πεπραγμένων

Το επιστημονικό αντικείμενο του Προγράμματος αυτού συνίσταται σε τρεις διαφορετικές επιστημονικές περιοχές: 1) Στην επίλυση Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ), με αρχικές ή/και συνοριακές συνθήκες, με μη συνεχείς συντελεστές και ορισμένες σε ανομοιογενή χωρία. Οι μέθοδοι που αναπτύχθηκαν είναι κυρίως αριθμητικές μέθοδοι καθώς και η μέθοδος Μετασχηματισμού Φωκά. 2) Στην ανάπτυξη κατάλληλων υπολογιστικών τεχνικών και υλοποίηση των μεθόδων σε κατάλληλα σειριακά και παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα. 3) Στην εφαρμογή των μεθόδων αυτών σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής, όπως η υφαλμύριση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης και η διάδοση πρωτογενών καρκινικών όγκων εγκεφάλου.

Το ερευνητικό έργο υλοποιήθηκε από τρεις ερευνητικές ομάδες: Την ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1), ως την κύρια ερευνητική ομάδα, και τις ομάδες του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας (ΚΕΟ 2) και του Πανεπιστημίου Πατρών (ΚΕΟ 3).

Πιο συγκεκριμένα, ανά Δράση το Πρόγραμμα υλοποιήθηκε ως εξής:

1.1 Δράση 1: ΣΥΝΤΟΝΙΣΜΟΣ ΕΡΓΟΥ

Συντονιστής του έργου σε όλη τη διάρκεια ήταν ο Καθηγητής Ι. Σαριδάκης, υπεύθυνος της 1^{ης} ερευνητικής ομάδας (Πολυτεχνείο Κρήτης). Υπεύθυνος της ερευνητικής ομάδας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ήταν ο Καθηγητής Η. Χούσσης και της ερευνητικής ομάδας του Πανεπιστημίου Πατρών, ο Καθηγητής Σ. Λυκοθανάσης. Κατά τη διάρκεια του έργου έγιναν 7 τακτικές συναντήσεις του συντονιστή με τους υπευθύνους των άλλων ομάδων, για την παρακολούθηση της πορείας του φυσικού και οικονομικού αντικειμένου, για το συντονισμό των συνεργασιών καθώς και για την επίλυση έκτακτων θεμάτων. Έγιναν 3 τακτικές ερευνητικές συναντήσεις όπου συμμετείχαν όλα τα μέλη των ερευνητικών ομάδων και 6 έκτακτες συναντήσεις. Στις συναντήσεις αυτές, μέλη παρουσίαζαν τα μέχρι εκείνη τη στιγμή ερευνητικά τους αποτελέσματα και έθεταν τους επόμενους στόχους. Με τις συναντήσεις αυτές καθώς και με άλλου είδους επικοινωνία όπως τηλεδιασκέψεις, επιτεύχθηκε μια καλή όσμωση των ερευνητικών ομάδων που είχε ως συνέπεια την παραγωγή υψηλού επιπέδου ερευνητικού έργου.



Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής: τρεις Ετήσιες Εκθέσεις Προόδου, καθώς και η Τελική Έκθεση Πεπραγμένων και Μελλοντικής Συνεργασίας.

1.2 Δράση 2.1: ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ/ΑΣΥΝΕΧΕΙΣ ΜΕΘΟΔΟΙ COLLOCATION

Η Δράση 2.1 αφορά στην έρευνα για την ανάπτυξη Υβριδικών - Ασυνεχών Μεθόδων Collocation με στόχο την επίλυση μη κλασικών ΜΔΕ πολλαπλών χωρίων (multiphysics, multidomain). Χαρακτηριστικά στοιχεία τους οι ασυνεχείς συντελεστές και τα ανομοιογενή χωρία. Τα προβλήματα αυτά προκύπτουν από τη μοντελοποίηση της εξέλιξης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο καθώς και από την εισβολή θαλασσινού νερού σε παράκτιους υπόγειους υδροφορείς. Περιγράφονται δε, γενικά, από μία μη γραμμική παραβολική ή ελλειπτική ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης στις διεπαφές.

Η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης ανέπτυξε κατ' αρχήν βασικά μαθηματικά εργαλεία που είναι:

- Η εισαγωγή μίας νέας βάσης κυβικών πολυωνύμων παρεμβολής Hermite με ασυνεχή παράγωγο στα σημεία διεπαφής, που προσομοιώνει συμπεριφορά των λύσεων σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων.
- Την παραγωγή των βασικών πινάκων Collocation, σε επίπεδο στοιχείων και σε επίπεδο συντελεστών του παραγόμενου συστήματος, που αντιστοιχούν στους γραμμικούς όρους της ασυνεχούς ΜΔΕ σε μία χωρική διάσταση.
- Την παραγωγή των βασικών πινάκων Collocation για ασυνεχείς ΜΔΕ σε δύο χωρικές διαστάσεις με χρήση τανυστικών γινομένων (tensorproducts).
- Την παραγωγή των βασικών πινάκων Collocation που αντιστοιχούν στους μη-γραμμικούς όρους της ασυνεχούς ΜΔΕ με χρήση γινομένων Hadamard.

Έγινε κατάλληλος συνδυασμός των εργαλείων αυτών με αποτέλεσμα την ανάπτυξη της νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου, για την επίλυση Προβλημάτων Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών Πολλαπλών Πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) στις περιπτώσεις:

- Γενικευμένων γραμμικών και μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 (μία χρόνου + μία χωρική) διαστάσεις όπου διαπιστώθηκε σύγκλιση τέταρτης τάξης.
- Γενικευμένων γραμμικών και μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις, με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης ως



προς τη μία διάσταση με σύγκλιση τετάρτης τάξης.

- Γενικευμένων γραμμικών και μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με γενικό ασυνεχή συντελεστή διάχυσης, όπου διαπιστώθηκε μείωση της τάξης σύγκλισης στις εσωτερικές γωνίες. Αυτό αντιμετωπίστηκε με προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με μία νέα γενικευμένη κυβική συνάρτηση στις δύο διαστάσεις.

Η προτεινόμενη μέθοδος Collocation συνδυάστηκε με κατάλληλα υψηλής τάξης σχήματα διακριτοποίησης Runge-Kutta (Diagonally Implicit, Strong Stability Preserving, Implicit-Explicit) ως προς το χρόνο.

Μελετήθηκε επίσης η απεικόνιση των μεθόδων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα και κατασκευάστηκαν νέοι παράλληλοι αλγόριθμοι, κατάλληλοι για περιβάλλοντα CPU-GPU. Ως μέθοδοι για την επίλυση των παραγόμενων Γραμμικών Συστημάτων, χρησιμοποιήθηκε η προρρυθμισμένη BiCGSTAB επαναληπτική μέθοδος, όπου παρατηρήθηκε σημαντική επιτάχυνση.

Τέλος, σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, αναπτύχθηκε μία υβριδική μέθοδος Collocation η οποία χρησιμοποιεί Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (MXΔ) για την αντιμετώπιση των ασυνεχειών.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

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

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



Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation, Proceedings of the World Congress on Engineering 2015, Vol I, pp. 137-142, WCE-ICAEM 2015, July 1 - 3, 2015, London, U.K. (Best Paper Award)

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

Επισημαίνουμε ότι υπάρχουν και άλλες σχετικές εργασίες με το γνωστικό αντικείμενο της δράσης που αναφέρονται σε άλλες δράσεις.

- Παραδόθηκε και είναι διαθέσιμο προς χρήση από κάθε ενδιαφερόμενο, το παραγόμενο λογισμικό επαλήθευσης και εφαρμογής των μεθόδων.

Τα παραδοτέα αυτά υπερκαλύπτουν τα υποσχόμενα παραδοτέα της πρότασης.

1.3 Δράση 2.2: ΜΕΘΟΔΟΙ ΧΑΛΑΡΩΣΗΣ ΣΤΙΣ ΔΙΕΠΑΦΕΣ - ΜΧΔ

Η Δράση αυτή αφορά στην ανάπτυξη και μελέτη νέων προχωρημένων μεθόδων χαλάρωσης στις διεπαφές σε ανομοιογενή χωρία, κατάλληλων για προβλήματα σύνθετων ΜΔΕ για την αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές τους. Υλοποιήθηκαν οι επιμέρους στόχοι:

- Ανασκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων (multi-domain, multi-physics problems, MDMP problems) με έμφαση σε προβλήματα Ιατρικής και την Περιβαλλοντικής Φυσικής.
- Ανασκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα.
- Έγινε πειραματική μελέτη των αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη κανονικά πεδία με στόχο την προσέγγιση των σύνθετων γεωμετριών όπως η λευκή και φαιά ουσία στην περιοχή του εγκεφάλου για το πρόβλημα της Ιατρικής και η αλλαγή στη σύσταση του υπεδάφους στο πρόβλημα της Περιβαλλοντικής Φυσικής.
- Υλοποιήθηκαν τα παραπάνω στα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής

Αρχικά, μελετήθηκαν steady state ελλειπτικά προβλήματα και υλοποιήθηκαν σε λογισμικό FEniCS.



Στη συνέχεια έγινε χρήση ΜΧΔ για παραβολικά προβλήματα ξανά σε λογισμικό FEniCS. Μελετήθηκε η συμπεριφορά τους τόσο σε προβλήματα μοντέλα όσο και για το πρόβλημα του εγκεφάλου, με καλά αποτελέσματα αντίστοιχα με εκείνα της ασυνεχούς μεθόδου Collocation.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:

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

Επισημαίνουμε ότι υπάρχουν και άλλες σχετικές εργασίες με το γνωστικό αντικείμενο της δράσης που αναφέρονται σε άλλες δράσεις. Για παράδειγμα:

- A.Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, *Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method*, 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), 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.
- Παραδόθηκε πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων:
1. Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.
 2. Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την εύρεση των interface points σε μη κανονικές γεωμετρίες με χρήση των KD trees.
 3. Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για τη δημιουργία γραφικών παραστάσεων των επιμέρους λύσεων στο αρχικό χωρίο του προβλήματος.

Τα παραδοτέα αυτά υπερκαλύπτουν τα υποσχόμενα παραδοτέα της πρότασης.

Κύρια ερευνητική ομάδα αυτής της δράσης είναι η ΚΕΟ 2 του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας. Αναπτύχθηκε όμως ευρεία συνεργασία με μέλη από άλλες ερευνητικές ομάδες: Με την ΚΕΟ 1 Πολυτεχνείου Κρήτης, κυρίως για την υλοποίηση των ΜΧΔ μέσα σε μεθόδους Collocation για την επίλυση παραβολικών προβλημάτων με ασυνέχεια στην παράγωγο. Με την ομάδα ΚΕΟ 3 Πανεπιστημίου Πατρών για τον έλεγχο και την επαλήθευση των μεθόδων ΜΔΧ για την επίλυση προβλημάτων με πολλαπλά χωρία και φυσικά μοντέλα με μεθόδους Πεπερασμένων Στοιχείων μέσα από την πλατφόρμα FEniCS σε σειριακή, παράλληλη και ασύγχρονη εκδοχή τόσο για ελλειπτικά όσο και για παραβολικά προβλήματα. Και οι τρεις ερευνητικές ομάδες συνεργάστηκαν για την εφαρμογή ΜΔΧ στο πρόβλημα της υπεράντλησης νερού, από την Περιβαλλοντική Μηχανική. Η έρευνα πάνω στις ΜΧΔ κυρίως με τεχνικές POB και GEO, φαίνεται ότι είναι υποσχόμενη να δώσει και μελλοντικά, σοβαρά θεωρητικά και πρακτικά αποτελέσματα.

1.4 Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Η Δράσης 2.3 αφορά στην ανάπτυξη υβριδικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ οι οποίες θα αποτελούνται από τον συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo, για την κατάτμηση του αρχικού σύνθετου προβλήματος ΜΔΕ σε ένα σύνολο ανεξάρτητων υπο-προβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων όπως πεπερασμένων στοιχείων ή πεπερασμένων διαφορών για την προσέγγιση των λύσεων των υπο-προβλημάτων.

Έγινε υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα. Αυτή παρουσιάζει ενδιαφέρον λόγω της φύσης των στοχαστικών μεθόδων να είναι παραλληλίσιμες, αλλά και για το λόγο ότι τα σχήματα αυτά έχουν πλεονεκτήματα ως προς τη δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα.

Στα πλαίσια της Δράσης 2.3, πραγματοποιήθηκε μελέτη των αλγορίθμων ΜΧΔ με ασύγχρονη συμπεριφορά. Σε κάθε επανάληψη, η επίλυση των επιμέρους προβλημάτων, αλλά και η χαλάρωση στις διεπαφές, μπορεί να πραγματοποιηθεί παράλληλα για όλα τα υποχωρία. Η παραλληλισμότητα μπορεί να αντιμετωπισθεί συγχρονισμένα αλλά και εντελώς ασύγχρονα.



Μελετήθηκε η μέθοδος Cholesky καθώς και τεχνικές για την αποδοτικότερη υλοποίησή της σε μνήμες στερεάς κατάστασης (non-volatile memories). Διερευνήθηκε η χρήση ενδιάμεσων buffers για την πραγματοποίηση μαζικών (batch) εγγραφών και αναγνώσεων των στοιχείων πλήρωσης, καθώς και οι δυνατότητες προ-ανάκτησής τους (pre-fetching) στα διάφορα στάδια της παραγοντοποίησης. Πραγματοποιήθηκε, επίσης, πειραματική επαλήθευση των προτεινόμενων βελτιστοποιήσεων. Στα πειράματα χρησιμοποιήθηκαν και αραιοί πίνακες που προέκυψαν από τα ερευνητικά αποτελέσματα του έργου.

Στο επίπεδο της υλοποίησης οικοδομήθηκε η εμπειρία σε θέματα διατύπωσης, υλοποίησης και πειραματικής μεθοδολογίας μετα-μεθόδων, που εκμεταλλεύονται τις ιδιαιτερότητες των επιμέρους προβλημάτων που συνθέτουν το αρχικό πρόβλημα. Τα αποτελέσματα της Δράσης 2.3 αξιοποιήθηκαν σε όλες σχεδόν τις δραστηριότητες της Δράσης 4.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

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

Άλλες σχετικές εργασίες που αναφέρονται σε άλλες δράσεις είναι για παράδειγμα οι:

- Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, "On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems", Journal of Mathematics and Statistical Science. Accepted 10/2015, in press.
- P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, "Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains",

Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

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

➤ Το παραγόμενο λογισμικό που βρίσκεται στους ιστοχώρους:

1. <https://github.com/mvavalis/Hybrid-numerical-PDE-solvers> και
2. https://github.com/mvavalis/multidomain_multiphysics.
3. Ιστοσελίδα του έργου

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

1.5 Δράση 2.4: ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΕΤΑΣΧΗΜΑΤΙΣΜΟΥ ΦΩΚΑ

Η Δράση αυτή αφορά στη μελέτη και προσαρμογή της καινοτόμου μαθηματικής μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές. Περιλαμβάνεται η ανάπτυξη αναλυτικών ή αριθμητικών μεθόδων επίλυσης των γενικευμένων συνθηκών ή των αντίστοιχων Dirichlet-Neumann απεικονίσεων στην περίπτωση ασυνεχών συντελεστών και η ανάπτυξη λύσεων κλειστής μορφής ως προς τον χρόνο σε ευαίσθητα προβλήματα, όπως εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου.

Προσαρμόστηκε και επεκτάθηκε η μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά ώστε να λύνει σε κλειστή μορφή γραμμικά Προβλήματα Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών Πολλαπλών Πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) που χαρακτηρίζονται από ασυνεχή συντελεστή διάχυσης και συνεπώς από ασυνεχή παράγωγο. Η μεθοδολογία και τα βασικά εργαλεία που αναπτύχθηκε περιγράφονται ως εξής:

- Έγινε διακριτοποίηση στο αρχικό πρόβλημα σε υποχωρία που ο συντελεστής διάχυσης παραμένει συνεχής και επομένως η λύση ικανοποιεί ιδιότητες αναλυτικής συνάρτησης. Θεωρώντας κατάλληλες συνοριακές συνθήκες στα άκρα του υποχωρίου, που είναι και σημεία διεπαφής, έχει δοθεί σε κλειστή μορφή τη λύση του ΠΑΣΣ σε κάθε υποχωρίο, μέσω της επέκτασης του κλασσικού φορμαλισμού της μεθόδου



Φωκά και μέσω μίας νέας ολικής συνθήκης. Η λύση εξαρτάται από την αρχική συνθήκη, αλλά και από τιμές της συνάρτησης και της παραγώγου στις διεπαφές που παραμένουν άγνωστες.

- Οι σχέσεις της ολικής συνθήκης και κατάλληλοι μετασχηματισμοί τους, παράγουν ένα γραμμικό σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων για τον υπολογισμό των άγνωστων ποσοτήτων που ολοκληρώνει την επίλυση ενός ΠΑΣΣ-ΠΠ σε κλειστή μορφή.
- Χρησιμοποιήθηκε αριθμητική παραγωγή σε υπερβολικές καμπύλες για την προσέγγιση της αναλυτικής λύσης, με εκθετική τάξη σύγκλισης.
- Για προβλήματα με ασυνέχειες στο χρόνο χρησιμοποιήθηκαν κατάλληλες τεχνικές επανέναρξης της διαδικασίας με νέες αρχικές συνθήκες.

Με κατάλληλους συνδυασμούς των παραπάνω, επιτεύχθηκε η λύση σε κλειστή μορφή σύνθετων γραμμικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στη χρονική και σε μια χωρική(1+1) διάσταση.

Για την επέκταση των παραπάνω αποτελεσμάτων σε μη γραμμικά προβλήματα καθώς και σε προβλήματα σε δύο χωρικές (1+2) διαστάσεις, η συνεργαζόμενη ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Cambridge και Notre Dame μελέτησε την επέκταση της μεθόδου Φωκά για:

- Τη γραμμική και μη γραμμική ΜΔΕ του Schrödinger στις 1+1 διαστάσεις με αρχικές και συνοριακές συνθήκες σε χώρους Sobolev.
- Την επέκταση της γραμμικής εξίσωσης της θερμότητας στις δύο χωρικές διαστάσεις με πλάγιες Neumann συνοριακές συνθήκες.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

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

1. D.Mantzavinos MG Papadomanolaki, AG Sifalakis and YG Saridakis, *Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions*, J Applied Numerical Mathematics (2014), in press, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2014.09.006>
2. M Asvestas, AG Sifalakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity*, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012143.
3. M Asvestas, EP Papadopoulou, AG Sifalakis and YG Saridakis, *The Unified Transform for a Class of Reaction-Diffusion Problems with*

Discontinuous Time Dependent Parameters, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.

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

Στα πλαίσια του έργου εντάσσεται και το άρθρο: D. Mantzavinos and A.S. Fokas, *The Unified Transform For The Heat Equation: II. Non-Separable Boundary Conditions In Two Dimensions*, European J Applied Math, 2015 (<http://dx.doi.org/10.1017/S0956792515000224>). Το άρθρο δεν μπορεί να θεωρηθεί ως παραδοτέο λόγω μη-ορθής σήμανσης.

Τέλος, άλλα άρθρα που πραγματεύονται την μέθοδο Φωκά έχουν δημοσιευτεί σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων αλλά αποδίδονται ως παραδοτέα της δράσης 4.2.

Τα παραδοτέα αυτά υπερκαλύπτουν τα υποσχόμενα παραδοτέα της πρότασης.

Σημαντικότατη ήταν η συνεργασία με τον Καθηγητή Α. Φωκά του Πανεπιστημίου Cambridge, ως μετακαλούμενου Έλληνα ερευνητή του προγράμματος ο οποίος συμμετείχε σε όλα τα αποτελέσματα της δράσης. Καθοριστική επίσης ήταν και η συνεργασία με τον ερευνητικό συνεργάτη Δ. Μαντζαβίνο του Πανεπιστημίου Notre Dame.

1.6 Δράση 3.1: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ CLUSTERS, GRIDS ΚΑΙ CLOUDS

Η Δράση 3 αναφέρεται γενικά στη χρήση σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών αφενός μεν στην υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων και του αντίστοιχου επιστημονικού λογισμικού, που θα αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της Δράσης 2 (ιδιαίτερα 2.2 και 2.3), αφετέρου δε στην ανάπτυξη της πλατφόρμας λογισμικού της Δράσης 4. Η υλοποίησή του λογισμικού πραγματοποιήθηκε από δύο διαφορετικές δράσεις (3.1 και 3.2).

Αντικείμενο της συγκεκριμένης δράσης αποτελεί η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλής φυσικής σε σύγχρονες παράλληλες αρχιτεκτονικές.

Αρχικά η υλοποίηση έλαβε χώρα σε επίπεδο συστοιχιών υπολογιστών (Clusters). Η υλοποίηση των μεθόδων αφορά τόσο σε ομοιογενή, συμμετρικά σχήματα όπου γίνεται χρήση ενός συγκεκριμένου προγραμματιστικού μοντέλου ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI), όσο και σε ετερογενή, μη συμμετρικά σχήματα, όπου ο παραλληλισμός των μεθόδων επιτελείται σε πολλαπλά

επίπεδα. Σύμφωνα με αυτά τα συνεργατικά σχήματα εφαρμόστηκε συνδυασμός μοντέλων ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI) με μοντέλα προγραμματισμού κοινής μνήμης (OpenMP, Pthreads) για την περισσότερο ευέλικτη αξιοποίηση των επεξεργαστών πολλαπλών πυρήνων που περιέχονται σε κάθε κόμβο του Cluster.

Κατά το επόμενο στάδιο της συγκεκριμένης δράσης η υλοποίηση έγινε σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (webservices). Στην περίπτωση αυτή το παρεχόμενο λογισμικό είναι σε θέση να αξιοποιεί με καλύτερο τρόπο τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, ιδιαίτερα κατά την περίπτωση όπου υποβάλλονται μέσω του Cloud αιτήσεις για παράλληλη εκτέλεση από περισσότερους του ενός χρήστες. Για το λόγο αυτό στη δράση 4.1 υλοποιήθηκε το μοντέλο Λογισμικό ως Υπηρεσία (**SaaS – Software as a Service**), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδικτυακού γραφικού περιβάλλοντος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές.

Συγκεκριμένα, έγιναν οι παρακάτω ενέργειες:

- Μελέτη σχετικής βιβλιογραφίας
- Εγκατάσταση και δοκιμαστική λειτουργία Πλατφόρμας FEniCS.
- Εγκατάσταση Εικονικού Cluster σε OpenStack (Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής – ΤΕΙ Δ. Ελλάδας).
- Παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου MonteCarlo σε Cluster (σε OpenStack).
- Προετοιμασία FeniCS για παράλληλη υλοποίηση των IR Μεθόδων (π.χ. σύνδεση με βιβλιοθήκες, κ.λ.π.).
- Παράλληλη υλοποίηση της IR GEO στη FeniCS (με RabbitMQ), σε περιβάλλον Cloud.
- Παράλληλη υλοποίηση της IR ROB στη FeniCS (με RabbitMQ) , σε περιβάλλον Cloud.
- Σύγχρονη / ασύγχρονη υλοποίηση της IR GEO στη FeniCS (με RabbitMQ) , σε περιβάλλον Cloud.
- Αξιολόγηση των μεθόδων σε benchmark προβλήματα.
- Υλοποίηση Μεθόδων Χαλάρωσης στη Διεπαφή σαν Υπηρεσία (IaaS) , σε περιβάλλον Cloud.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:
 1. A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, P. Alefragis, S. Likothnassis, “Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO”, Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.
 2. P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, “Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multidomains

”Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

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

Σχετική εργασία που αναφέρεται σε άλλη δράση είναι και η:

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

➤ Το Software παράλληλης υλοποίησης των αλγορίθμων.

Συνολικά, η ΚΕΟ3 σε συνεργασία με τις άλλες 2 ΚΕΟ, έχει ολοκληρώσει τα παρακάτω παραδοτέα:

1. 3 Ετήσιες Τεχνικές Εκθέσεις και την Τελική Έκθεση Προόδου
2. Τα παραπάνω 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων σχετικά με το αντικείμενο του έργου.
3. Στα πλαίσια του έργου ολοκληρώθηκε μια μεταπτυχιακή διπλωματική εργασία, από την εξωτερική συνεργάτιδα κα Αίγλη Κορφιάτη, μεταπτυχιακής φοιτήτριας στο μεταπτυχιακό πρόγραμμα ειδίκευσης “Επιστήμη και τεχνολογία Υπολογιστών”, του Τμήματος Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών. Η επίβλεψη της Μ.Δ.Ε. έγινε από τον Επιστημονικό Υπεύθυνο της ΚΕΟ3 καθηγητή Σ. Λυκοθανάση. Το θέμα της εργασίας είναι:
«Σχεδιασμός και υλοποίηση προηγμένων μαθηματικών μεθόδων για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές».
4. Είναι υπό συγγραφή 1 επιστημονικό άρθρο για υποβολή σε επιστημονικό περιοδικό. Θα αφορά την παραλληλοποίηση των 2 μεθόδων της Interface Relaxation (GEO, ROB) στην Πλατφόρμα FEniCS.
5. Ο κώδικας των παράλληλων υλοποιήσεων των μεθόδων InterfaceRelaxation (GEO, ROB) και MonteCarlo.

Κατά τη διάρκεια του έργου η ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Πατρών ΚΕΟ 3, ανέπτυξε συνεργασίες:

- Με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ΚΕΟ 2, σε θέματα υλοποίησης της μεθόδου Interface Relaxation στην πλατφόρμα FEniCS (με την Αν. Καθηγήτρια Γ. Τσομπανοπούλου). Συγκεκριμένα, υλοποιήθηκαν

- παράλληλα οι μέθοδοι IR – GEO και η IR – ROB στην Πλατφόρμα FEniCS. Επίσης, εκτός από τη σύγχρονη, έγινε και ασύγχρονη υλοποίηση της μεθόδου IR – GEO, στη FEniCS. Τέλος έγινε παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου Monte Carlo σε p-Threads (με τον Καθηγητή Μ. Βάβαλη και τον υποψήφιο διδάκτορα Μ. Μαρούδα), σε Cluster (σε OpenStack).
- Με όλα τα μέλη της ΚΕΟ 1, σε θέματα παράλληλης υλοποίησης της μεθόδου ALOPEX, για την επίλυση του προβλήματος Περιβαλλοντικής Μηχανικής. Παραλληλοποιήθηκε από την ΚΕΟ3 η μέθοδος Alopex στην εφαρμογή της για το πρόβλημα της υφαλμύρινσης υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης στα πηγάδια στο Βαθύ της Καλύμνου που έχει υλοποιηθεί από την ΚΕΟ 1, στη FEniCS.

Επισημαίνουμε ότι βρίσκεται σε εξέλιξη η διδακτορική διατριβή της εξωτερικής συνεργάτιδας κας Αίγλης Κορφιάτη η οποία πραγματεύεται θέματα που είναι απολύτως σχετικά με την ερευνητική δραστηριότητα του έργου. Η διατριβή βρίσκεται στο 2^ο έτος, υπό την επίβλεψη του Επιστημονικού Υπεύθυνου της ΚΕΟ 3 καθηγητή Σ. Λυκοθανάση και έχει θέμα:

«Σχεδιασμός και υλοποίηση ολοκληρωμένου περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων σε αρχιτεκτονικές υψηλής επίδοσης και εφαρμογές»

Η εξέλιξη της διατριβής είναι ένας ακόμη επιπρόσθετος λόγος για τον οποίο η ΚΕΟ3 θα συνεχίσει την συνεργασία της με τις άλλες δύο ΚΕΟ, παρόλο που το έργο ολοκληρώθηκε.

1.7 Δράση 3.2: ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES)

Η Δράσης 3.2 αφορά στην αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε αρχιτεκτονικές επεξεργασίας γραφικών (Graphics Processor Units, GPU) καθώς και σε επαναδιατασσόμενες (reconfigurable) αρχιτεκτονικές (πχ. Field Programmable Gate Arrays, FPGAs).

Με βάση τα αποτελέσματα της μελέτης μεταφέρθηκαν και απεικονίστηκαν τα πακέτα λογισμικού – είτε καθολικά, είτε κατά τμήματα - στα κατάλληλα κατά περίπτωση πολυπύρρηνα συστήματα. Επίσης κατασκευάστηκε εξειδικευμένο υλικό για την επιτάχυνση συγκεκριμένων υπολογιστικών πυρήνων των εφαρμογών και το απαραίτητο λογισμικό για την επικοινωνία με τον υπολογιστή (Host computer).

Για την υλοποίηση σε FPGA, χρησιμοποιήθηκε λογισμικό CAD που αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας. Το λογισμικό αυτό μετατρέπει εφαρμογές που έχουν αναπτυχθεί σε OpenCL σε επιταχυντές υλικού (hardware accelerators). Επιταχύνθηκε έτσι η ανάπτυξη ενός συστήματος FPGA χωρίς να χρειάζονται γνώσεις της αρχιτεκτονικής του συστήματος.

Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι οι αρχιτεκτονικές GPU και FPGA είναι πολύ πιο αποδοτικές όσον αφορά τον χρόνο εκτέλεσης αλλά και την κατανάλωση ισχύος σε σχέση με τις συμβατικές CPUs. Χρησιμοποιώντας διατάξεις επαναδιατασσόμενης λογικής (FPGAs) ένας σχεδιαστής τέτοιων συστημάτων μπορεί να υλοποιήσει μια σειρά από αρχιτεκτονικές που καλύπτουν μεγάλη γκάμα απόδοσης, κόστους και κατανάλωσης ισχύος. Αυτό το συμπέρασμα χρησιμοποιήθηκε για την δημιουργία ενός ετερογενούς συστήματος που αποτελείται από συμβατικές CPUs οι οποίες μεταφέρουν τμήματα του υπολογισμού με υψηλές υπολογιστικές απαιτήσεις σε επιταχυντές GPU και FPGAs.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής:

- Τρεις ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μια τελική.
- Δημοσιεύτηκαν 3 επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων:

1. K. Krommydas, W. Feng, M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *On the Characterization of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Platforms*, 25th IEEE Systems, Archit. & Processors, IEEE Xplore Proc ASAP, pp 153-160, 2014 (Best Paper Candidate)
2. M. Owaida, CD Antonopoulos, N. Bellas, *A grammar induction method for clustering of operations in complex FPGA's designs*, IEEE 22nd Int. Symp. F.-Prog. Cust. Mac., IEEE Xplore Proc FCCM, pp 194-201, 2014
3. K. Krommydas, W. Feng, CD Antonopoulos, N. Bellas, *OpenDwarfs: Characterization of Dwarf-Based Benchmarks on Fixed and Reconfigurable Architectures*, J Sign Process Syst, 2015 (Αποδεκτό για δημοσίευση)

Έχει επίσης υποβληθεί προς δημοσίευση το άρθρο:

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

- Το λογισμικό του σχεδιασμού των επιταχυντών υλικού (hardwareaccelerators) σε γλώσσα Verilog καθώς και το λογισμικό OpenCL για υλοποίηση σε GPU.

Κύρια ερευνητική ομάδα της Δράσης αυτής είναι ΚΕΟ 2 του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας. Οι συνεργασίες που έλαβαν χώρα στα πλαίσια της Δράσης 3.2 ήταν οι εξής:

- Εσωτερικές συνεργασίες με τις άλλες ομάδες, κυρίως με μέλη της ομάδας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.
- Εξωτερικές συνεργασίες με δύο πανεπιστήμια του εξωτερικού: με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Paololenne στο École polytechnique



fédérale de Lausanne (EPFL) στην Λωζάννη της Ελβετίας. Επίσης με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Wu-chun Feng στο Virginia Tech στις ΗΠΑ.

1.8 Δράση 4.1: ΣΥΓΚΕΡΑΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ

Η Δράση 4.1 αφορά στον συγκερασμό των ερευνητικών δραστηριοτήτων στα πλαίσια των υπολοίπων δράσεων του έργου με στόχο την σχεδίαση και την ανάπτυξη περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων το οποίο θα είναι κατάλληλο για τις εφαρμογές ενδιαφέροντος του έργου (Multi-Domain / Multi-Physics) και ταυτόχρονα θα είναι ικανό να αξιοποιήσει σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές (multicore CPUs, GPUs, FPGAs, γρήγορα μέσα αποθήκευσης, υποδομή Cloud).

Πιο συγκεκριμένα, οι σημαντικότεροι στόχοι της δράσης είναι οι ακόλουθοι:

1. Επιλογή βασικού περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων.
2. Επέκταση του περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου.
3. Επέκταση του περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων για την αξιοποίηση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ετερογενών συστημάτων, υποδομής cloud, αλλά και σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage).

Για την επιλογή βασικού περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων η ερευνητική ομάδα επέλεξε το πακέτο FEniCS το οποίο αποτελεί μια συλλογή ελεύθερων εργαλείων λογισμικού εξειδικευμένων στην αυτόματη και αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων.

Αναφορικά με την επέκταση του περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου, ο βασικός στόχος των επεκτάσεων της ερευνητικής ομάδας ήταν η σχεδίαση και η υλοποίηση ενός περιβάλλοντος μετα-υπολογισμού το οποίο υποστηρίζει προβλήματα Multi-Domain / Multi-Physics, χωρίς να απαιτούνται αλλαγές στα χαμηλά επίπεδα του FEniCS (δημιουργία συστημάτων, γραμμική επίλυση συστημάτων κλπ). Οι επεκτάσεις αυτές είναι διαθέσιμες στον προγραμματιστή του FEniCS με απόλυτα "φυσικό" τρόπο.

Στα πλαίσια της υποστήριξης προβλημάτων Multi-Domain / Multi-Physics υλοποιήθηκαν οι ακόλουθες μέθοδοι χαλάρωσης στις διεπαφές:



- Μέθοδος Schwarz για προβλήματα με επικαλυπτόμενα υποχωρία.
- Στοχαστική μέθοδος εκτίμησης των τιμών στις διεπαφές.
- Μέθοδος Geometric Contraction (GEO).
- Μέθοδος ROB.

Αναφορικά με τον τρίτο κύριο στόχο της εν λόγω δράσης υλοποιήθηκαν διάφορες επεκτάσεις στο FEniCS για την αξιοποίηση επιλυτών υλοποιημένων σε επιταχυντές, επιλυτών που αξιοποιούν μέσα αποθήκευσης flash, καθώς και για την υποστήριξη επιλυτών εξειδικευμένων σε συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων. Επίσης, πραγματοποιήθηκε μελέτη της αλληλεπίδρασης δημοφιλών πακέτων επιλυτών (in-core και out-of-core) για συστήματα γραμμικών εξισώσεων με αραιούς πίνακες, με αρχιτεκτονικές multicore CPUs, GPUs, καθώς και με συστήματα που ενσωματώνουν γρήγορα μέσα αποθήκευσης (flash storage). Ακολουθώντας, σχεδιάστηκαν και αναπτύχθηκαν βελτιώσεις στο υποσύστημα γρήγορης αποθήκευσης ώστε να είναι περισσότερο αποδοτικό για τις αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιούνται στα πλαίσια του έργου. Το περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων επεκτάθηκε ώστε να μπορεί να αξιοποιήσει υπηρεσίες που προσφέρονται στο cloud, όπως επίσης και να προσφέρει – με τη σειρά του – υπηρεσίες στο cloud. Η διασύνδεση βασίζεται σε δημοφιλή πρότυπα (SOAP, WSDL, ebXML). Τέλος, σχεδιάστηκε και υλοποιήθηκε προσαρμοσμένη αρχιτεκτονική cloud για την επίλυση προβλημάτων Multi-Domain / Multi-Physics που υλοποιεί μεθοδολογίες χαλάρωσης στη διεπαφή (Interface Relaxation as a Service – IRaaS).

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής τα οποία είναι σε συμφωνία και με το τεχνικό δελτίο του έργου, και τα οποία είναι τα ακόλουθα:

- Τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων.
- Πρότυπο λογισμικό για Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων το οποίο περιλαμβάνει τα ακόλουθα επιμέρους στοιχεία:
 - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη προβλημάτων MDMP (μέθοδοι Schwarz, υβριδική αιτιοκρατική/στοχαστική, GEO, ROB).
 - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη εναλλακτικών αρχιτεκτονικών (επέκταση Whale).
 - Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση cloud με χρήση web services.

- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την αξιοποίηση προσαρμοσμένων (custom) μηχανισμών cloud.
 - Η προσαρμοσμένη (custom) πλατφόρμα cloud IRaaS.
- Επιπλέον των παραδοτέων που προέβλεπε το τεχνικό δελτίο, στα πλαίσια της δράσης αυτής παρήχθησαν και οι ακόλουθες 5 δημοσιεύσεις:
1. Athanasios Fevgas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, "Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage", 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), 02-05 Sep 2014, Chania, Crete, Greece.
 2. V. Vasileiadis, CD Antonopoulos, G. Zindros, *Automating data management in heterogeneous systems using polyhedral analysis*, PCI 2015, ICPS ACM Proc, pp 317-322, 2015
 3. Athanasios Fevgas, Konstantis Daloukas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, "Efficient Solution of Large Sparse Linear Systems in Modern Hardware", 6th International Conference on Information, Intelligence, Systems and Applications (IISA2015), 06-08 July 2015, Corfu, Greece.
 4. Niki Sfika, Aigli Korfiati, Christos Alexakos, Spiros Likothanassis, Konstantis Daloukas and Panagiota Tsompanopoulou, "Dynamic Cloud Resources Allocation on Multidomain/Multiphysics Problems", The 3rd International Conference on Future Internet of Things and Cloud (FiCloud 2015), 24-26 August 2015, Rome, Italy.
 5. Christos Antonopoulos, Manolis Maroudas and Manolis Vavalis, "On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems", Journal of Mathematics and Statistical Science. Accepted 10/2015, in press.

1.9 Δράση 4.2: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΙΑΤΡΙΚΗΣ

Ο κύριος στόχος της Δράσης 4.2 ήταν η επικύρωση των αποτελεσμάτων της ερευνητικής ομάδας αναφορικά με την αποδοτικότητα μεθόδων στο πρόβλημα της εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων καθώς και η μελέτη της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, με χρήση νέων μεθόδων, λογισμικού και σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών.

Για την εν λόγω δράση η ερευνητική ομάδα χρησιμοποίησε γραμμικά και μη-γραμμικά μαθηματικά μοντέλα ώστε να περιγράψει το πρόβλημα εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων, τα οποία λαμβάνουν υπόψη την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού αλλά και προσομοιώνουν την επίδραση διάφορων πρωτοκόλλων ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας, με κεντρικό



στόχο την επικύρωση των αριθμητικών και αναλυτικών μεθόδων καθώς και του λογισμικού που ανέπτυξαν στα πλαίσια του έργου.

Για το σκοπό αυτό η ερευνητική ομάδα:

- Χρησιμοποίησε την γενικευμένη μη-γραμμική εξίσωση του Fisher, η οποία περιγράφει γενικά το πρόβλημα της βιολογικής εισβολής/μετακίνησης πληθυσμών και διαθέτει αναλυτική λύση, ώστε να επικυρωθεί η τάξη σύγκλισης της Hermite Collocation μεθόδου με Hadamard γινόμενα καθώς επίσης και να μελετηθεί η συμπεριφορά της όταν συνδυάζεται με Strong Stability Preserving Runge-Kutta (SSPRK) σχήματα διακριτοποίησης χρόνου.
- Μελέτησε και επικύρωσε τη συμπεριφορά της νέας ασυνεχούς Hermite Collocation μεθόδου σε γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων στις μία και δύο χωρικές διαστάσεις σε ορθογώνια χωρία.
- Μελέτησε και επικύρωσε τη συμπεριφορά της αναλυτικής μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά σε γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων.
- Επικύρωσε τη συμπεριφορά της υβριδικής Collocation μεθόδου με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ) σε γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας.
- Εφάρμοσε τεχνικές επανέναρξης της διαδικασίας στο χρόνο για να μελετηθεί η συμπεριφορά των μεθόδων Collocation και μετασχηματισμού Φωκά στην αντιμετώπιση εξελικτικών μοντέλων εφοδιασμένων με πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας/χημειοθεραπείας.
- Μελέτησε την απεικόνιση, σε CPU/GPU αρχιτεκτονικές, και επιτάχυνση των υπολογισμών που απαιτούνται για την επίλυση των εξισώσεων της ασυνεχούς Tensor Product Hermite Collocation μεθόδου, σε συνδυασμό με σχήματα SSPRK, για δισδιάστατα μοντέλα εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων.

Παράλληλα, σε συνεργασία με ιατρική ομάδα του Ναυτικού Νοσοκομείου Χανίων, η ερευνητική ομάδα προχώρησε στην ψηφιακή επεξεργασία απεικονίσεων Magnetic Resonance Imaging (MRI) του εγκεφάλου και στην ανάπτυξη αλγορίθμων για την οριοθέτηση των περιοχών με διαφορετικό συντελεστή διάχυσης (δηλ. Φαία και Λευκή ουσία). Εν συνεχεία, κάνοντας χρήση εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού, επετεύχθη η κατάλληλη διακριτοποίηση των χωρίων καθώς και η απαιτούμενη κωδικοποίηση της πληροφορίας αυτής προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Με τον τρόπο αυτό κατέστη δυνατή η μελέτη κατ' αρχήν γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε πραγματική γεωμετρία πεδίου με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής τα οποία είναι σε



συμφωνία και με το τεχνικό δελτίο του έργου, και τα οποία είναι τα ακόλουθα:

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

Επίσης έχει υποβληθεί ένα (1) άρθρο για δημοσίευση σε διεθνές επιστημονικό περιοδικό με τίτλο: «*The Fokas Method For Heterogeneous Reaction-Diffusion Brain Tumor Models That Incorporate Radiotherapy And Chemotherapy*» (by AG Sifalakis, MG Papadomanolaki, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis).

1.10 Δράση 4.3: ΕΠΙΚΥΡΩΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ

Ο κύριος στόχος της Δράσης 4.3 ήταν η επικύρωση των αποτελεσμάτων της ερευνητικής ομάδας αναφορικά με την αποδοτικότητα μεθόδων και λογισμικού στο πρόβλημα της υφαλμύρισης (διείσδυση θαλασσινού ύδατος) υπόγειων υδροφορέων γλυκών υδάτων καθώς επίσης και η ανάπτυξη λογισμικού για τη μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα με υψηλής ακρίβειας μεθόδους αλλά και αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

Για την εν λόγω δράση η ερευνητική ομάδα μελέτησε το πρόβλημα της



διείσδυσης θαλασσινού ύδατος σε παράκτιους υπόγειους υδροφορείς γλυκού νερού, χρησιμοποίησε το προσεγγιστικό μοντέλο του Strack το οποίο βασίζεται στις παραδοχές αφενός μεν ύπαρξης *απότομης σφήνας* (*sharp interface*) και συνεπώς ανυπαρξία ζώνης υφάλμυρου νερού (*transition zone*) μεταξύ του γλυκού και αλμυρού ύδατος, και αφετέρου της εξίσωσης Ghyben-Herzberg η οποία σε συνθήκες σταθερής κατάστασης (*steady state*) προσεγγίζει τη θέση της σφήνας. Η βασική ΜΔΕ του μοντέλου που περιγράφει το δυναμικό ροής ανήκει στην κατηγορία των ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων αφού ο συντελεστής διάχυσης, ο οποίος χαρακτηρίζει την υδραυλική αγωγιμότητα, είναι ασυνεχής λόγω γεωλογικής ανομοιογένειας του εδάφους.

Επίσης κεντρικός στόχος της ερευνητικής ομάδας για την εν λόγω δράση αναδείχθηκε η ανάπτυξη και μελέτη ενός συστήματος βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα μέσω στοχαστικών αλγορίθμων βελτιστοποίησης.

Για το σκοπό αυτό η ερευνητική ομάδα:

- Κατασκεύασε και μελέτησε τη σύγκλιση μίας νέας έκδοσης του ευέλικτου στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης Algorithm of Pattern Extraction (ALOPEX).
- Κατασκεύασε ένα σύστημα «επιδιόρθωσης» του αλγορίθμου για την εφαρμογή των περιοριστικών συνθηκών (*constraints*) του προβλήματος καθώς και ένα αποτελεσματικό κριτήριο τερματισμού του αλγορίθμου.
- Μελέτησε τη συμπεριφορά του νέου αλγορίθμου καθώς και την ευστάθεια των λύσεων που παράγει σε ένα αναλυτικό μοντέλο εισβολής θαλάσσιου ύδατος σε ομογενείς ορθογώνιους παράκτιους υπόγειους υδροφορείς.

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης εφαρμόστηκε με επιτυχία, στη συνέχεια, σε συνδυασμό με το εξειδικευμένο λογισμικό PTC (Princeton Transport Code), ένα προσομοιωτή ροής και μεταφοράς μάζας στις τρεις (3) διαστάσεις, για να μελετηθεί το πρόβλημα πεδίου του έργου το οποίο αναφέρεται στον υπόγειο υδροφορέα της Χερσονήσου (Ηράκλειο Κρήτης). Η ευελιξία του αλγορίθμου και η ταχεία σύγκλισή του επέτρεψε την αποτελεσματική μελέτη του προβλήματος και παραγωγή νέων λύσεων για την αντιμετώπιση του προβλήματος υφαλμύρινσης του υδροφορέα της Χερσονήσου.

Παράλληλα, ο αλγόριθμος στη νέα μορφή του κωδικοποιήθηκε σε γλώσσα python, ώστε να καταστεί δυνατή η χρησιμοποίησή του από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Επίσης η ερευνητική ομάδα προχώρησε και στην ψηφιακή επεξεργασία του υδροφορέα της Χερσονήσου και στην οριοθέτηση των περιοχών με διαφορετική υδραυλική αγωγιμότητα καθώς και στην κατάλληλη διακριτοποίηση των χωρίων προς χρήση από την πλατφόρμα FEniCS. Το μοντέλο, εφοδιασμένο με τεχνικές εντοπισμού του μετώπου

υφαλμύρισης, είναι διαθέσιμο.

Επίσης, ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης χρησιμοποιήθηκε για την επικύρωση των αποτελεσμάτων του έργου και την περαιτέρω μελέτη των μεθόδων που αναπτύχθηκε σε προβλήματα υφαλμύρισης υδροφορέων. Πιο συγκεκριμένα, η ερευνητική ομάδα χρησιμοποίησε ένα μοντέλο ορθογώνιου υδροφορέα ανομοιογενούς υδραυλικής αγωγιμότητας που προσομοιώνει το υδροφορέα στο Βαθύ της Καλύμνου, για να μελετήσει τη συμπεριφορά της ασυνεχούς μεθόδου Collocation αλλά και των Μεθόδων Χαλάρωσης στις Διεπαφές καθώς και υβριδικών μεθόδων τύπου Schwarz που αποτελούν μέρος της επέκτασης της πλατφόρμας FEniCS που αναπτύχθηκε από την ομάδα του έργου στα πλαίσια της δράσης 4.1.

Παραδόθηκαν τα παραδοτέα της Δράσης αυτής τα οποία είναι σε συμφωνία και με το τεχνικό δελτίο του έργου, και τα οποία είναι τα ακόλουθα:

- Τρεις (3) ετήσιες τεχνικές εκθέσεις και μία (1) τελική τεχνική έκθεση
- Έχουν δημοσιευτεί τα παρακάτω τέσσερα (4) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων με κριτές:
 1. PN Stratis, ZA Dokou, GP Karatzas, EP Papadopoulou and YG Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete*, Proc. of INASE-WHH 2015 Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, pp 329-334, 2015.
 2. IE Athanasakis, ZA Dokou, EN Mathioudakis, PN Stratis and ND Vilanakis, *Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer*, J Math. Mod. Methods in Applied Sciences, 9, pp. 727-732, 2015
 3. PN Stratis, YG Saridakis, MS Zakynthinaki and EP Papadopoulou, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers*, 2nd Intern. Conf. on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490 (2014) 012112

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

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



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

1.11 Δράση 6: ΔΙΑΧΥΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Η Δράση 6 αφορά στις ενέργειες για τη διάχυση των αποτελεσμάτων του έργου.

Όπως προβλέπεται και στο τεχνικό δελτίο, η δημοσιοποίηση των αποτελεσμάτων πραγματοποιήθηκε με τη δημιουργία σχετικής ιστοσελίδας και με την οργάνωση επιστημονικής ημερίδας, καθώς επίσης με παρουσιάσεις και δημοσιεύσεις σε διεθνή συνέδρια και επιστημονικά περιοδικά αλλά και με τη διοργάνωση επιστημονικών ημερίδων.

Απολογιστικά, οι κύριες δραστηριότητες για την διάχυση των αποτελεσμάτων που αναπτύχθηκαν κατά τη διάρκεια του έργου περιλαμβάνουν:

I. Παρουσιάσεις/Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά Συνέδρια με Σύστημα Κριτών

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ	
Αριθμός	20
Ομιλίες	43
Δημοσιεύσεις	24*
Poster	2
ΔΙΑΚΡΙΣΕΙΣ	
Βραβείο Καλλίτερης Εργασίας	3
Βραβείο Καλλίτερης Εργασίας Νέου Ερευνητή	1
Certificate of Merit	1
Υποψηφιότητα Καλλίτερης Εργασίας	1

II. Δημοσιεύσεις σε Διεθνή Επιστημονικά Περιοδικά με Σύστημα Κριτών

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΠΕΡΙΟΔΙΚΑ	
Δημοσιευμένα & Υπό-Δημοσίευση Άρθρα	10*
Υπό-Κρίση Άρθρα	3

* Σημειώνουμε ότι έχει υπερκαλυφθεί ο στόχος του έργου για 18 δημοσιεύσεις σε επιστημονικά περιοδικά ή/και πρακτικά διεθνών συνεδρίων.

III. Διοργάνωση Επιστημονικών Ημερίδων/Σεμιναρίων (Workshops)

Διοργανώθηκαν 2 επιστημονικά workshops στα πλαίσια του διεθνούς συνεδρίου *NumAn 2014 – 6th International Conference in Numerical Analysis* με τίτλο:

- **Workshop on Fokas Method** (10 Presentations)
- **Workshop on Multi-Physics, Multi-Domain Problems** (10 Presentations)

Τα workshops αυτά τα παρακολουθήσαμε και οι δυο αξιολογητές Μ. Βραχάτης και Δ. Νούτσος ως μέλη του παραπάνω Επιστημονικού Συνεδρίου. Οι εντυπώσεις μας ήταν πάρα πολύ καλές. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον η συμμετοχή πολλών νέων ερευνητών με καταπληκτικές παρουσιάσεις.

IV. Ιστοσελίδα του έργου

Η τελική μορφή της ιστοσελίδας ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε στα μέσα του προγράμματος και ενημερωνόταν τακτικά έως και τη λήξη του από συνεργαζόμενο μέλος της 1^{ης} ερευνητικής ομάδας, ολοκληρώνοντας το σχετικό παραδοτέο της δράσης. Περιλαμβάνει πλήρη στοιχεία για τους στόχους του προγράμματος, τις πηγές χρηματοδότησης, τους συνεργαζόμενους εταίρους, τις δημοσιεύσεις, τα ερευνητικά αποτελέσματα κ.λ.π. Η ιστοσελίδα του έργου λειτουργεί στην ηλεκτρονική διεύθυνση

<http://www.tuc.gr/index.php?id=5209>

V. Διοργάνωση Ημερίδας Παρουσίασης των αποτελεσμάτων

Διοργανώθηκε η προβλεπόμενη στο έργο Ημερίδα Παρουσίασης των Αποτελεσμάτων (ΗΠΑ) του έργου στις 14 Νοεμβρίου 2015 στο Πολυτεχνείο Κρήτης. Παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα όλων των δράσεων με:



- 10 Παρουσιάσεις-Ομιλίες
- 9 Posters

Τα πρακτικά (οι παρουσιάσεις και τα posters) σε ηλεκτρονική μορφή έχουν αναρτηθεί στην ιστοσελίδα του έργου ολοκληρώνοντας τα σχετικά παραδοτέα του έργου. Στην ημερίδα, την οποία παρακολουθήσαμε και οι δύο αξιολογητές του έργου και ήταν ανοικτή στο κοινό, παραβρέθηκαν όλα τα μέλη των τριών κεντρικών ερευνητικών ομάδων που ανέλυσαν (μέσω των παρουσιάσεων και των posters) το επιστημονικό αντικείμενο και τα αποτελέσματα των δράσεων. Το επίπεδο των παρουσιάσεων ήταν επιστημονικά και τεχνικά υψηλό και ταυτόχρονα κατανοητό και κατατοπιστικό. Έγιναν εκτενείς συζητήσεις μεταξύ των μελών και των αξιολογητών. Ήταν εντυπωσιακός ο τρόπος παρουσίασης των αποτελεσμάτων που παρήχθησαν καθώς και των μεθόδων και τεχνικών που αναπτύχθηκαν στα προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής, όπως η υφαλμύριση υδροφορέων γλυκών υδάτων λόγω υπεράντλησης και η διάδοση πρωτογενών καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Έγινε καθαρό ότι η επιστημονική έρευνα είχε ως αφετηρία υπαρκτά προβλήματα, όπως τα παραπάνω. Ακολούθησαν οι αριθμητικές τεχνικές για την προσέγγιση του μοντέλου που διέπει το πρόβλημα και τέλος οι αριθμητικές μέθοδοι συνδυάστηκαν με την ανάπτυξη υπολογιστικών τεχνικών, κυρίως παράλληλων, για την υλοποίησή των. Μέσα από τις παρουσιάσεις, τα posters και τις συζητήσεις φάνηκαν τα εξής:

- Στο υπόεργο έγινε έρευνα υψηλού επιπέδου που χαρακτηρίζεται έντονα από τη διεπιστημονικότητα. Συνδυάστηκαν επιστημονικές περιοχές κυρίως της αριθμητικής επίλυσης προβλημάτων αρχικών ή συνοριακών τιμών ΜΔΕ με σύγχρονες τεχνικές υλοποίησης από την επιστήμη των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών.
- Η έρευνα χαρακτηρίζεται επίσης διαπανεπιστημιακή. Φάνηκε ότι έγινε πολύ καλή όσμωση των τριών ερευνητικών ομάδων: Πολυτεχνείο Κρήτης – Πανεπιστημίου Θεσσαλίας – Πανεπιστημίου Πατρών, καθώς και του μετακαλούμενου ερευνητή από το εξωτερικό, Α. Φωκά, με αποτέλεσμα να παραχθούν σημαντικά αποτελέσματα.
- Από το έργο ωφελήθηκαν πολύ νέοι ερευνητές: μεταπτυχιακοί φοιτητές, υποψήφιοι διδάκτορες, νέοι διδάκτορες.
- Άνοιξαν νέα πεδία επιστημονικής έρευνας για το μέλλον.

Συνέντευξη των Μελών των Ερευνητικών Ομάδων από τους Αξιολογητές

Την Κυριακή 15-11-2015 έγινε, στο Πολυτεχνείο Κρήτης, συνέντευξη – συζήτηση μεταξύ των μελών των ερευνητικών ομάδων και των δυο αξιολογητών. Εκεί φάνηκαν ακόμη περισσότερο:

- Η διεπιστημονικότητα της έρευνας,
- Η διαπανεπιστημιακότητα της έρευνας,

		
Ευρωπαϊκή Ένωση Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο	ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ	ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης		

- Το δέσιμο των τριών ερευνητικών ομάδων,
- Τα νέα επιστημονικά προβλήματα και οι προοπτικές για μελλοντική έρευνα,
- Η όρεξη των νέων επιστημόνων να συνεχίσουν την έρευνα στα πεδία που ανοίχτηκαν, αλλά και η αγωνία τους για το αν θα βρεθούν ευκαιρίες απασχόλησης για αυτούς, σαν αυτή του Προγράμματος ΘΑΛΗΣ.

2 ΣΥΝΟΨΗ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Συνοψίζοντας, στα πλαίσια αυτού του υποέργου ΘΑΛΗΣ, εκπονήθηκε επιστημονική έρευνα υψηλού επιπέδου η οποία δημοσιεύτηκε σε πρακτικά διεθνών επιστημονικών συνεδρίων, και σε υψηλού επιπέδου επιστημονικά περιοδικά. Τα επιτεύγματα αυτής της έρευνας χαρακτηρίζονται από τα παρακάτω:

1. Την ενίσχυση της Αριστείας.

Η ενίσχυση της αριστείας τεκμηριώνεται από τα παρακάτω:

- Εκπονήθηκε έρευνα υψηλού επιπέδου από την οποία προέκυψαν 26 δημοσιεύσεις σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων, 7 δημοσιεύσεις ή υπό δημοσίευση σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά υψηλού κύρους και 4 εργασίες βρίσκονται υπό κρίση. Έχουν απονεμηθεί 3 βραβεία καλλίτερης εργασίας, 1 βραβείο καλλίτερης εργασίας νέου ερευνητή και 1 Certificate of Merit.
- Προτάθηκαν λύσεις σε σύγχρονα επιστημονικά προβλήματα Περιβαλλοντικής Φυσικής και Ιατρικής, τα οποία μοντελοποιούνται σε προβλήματα αρχικών ή συνοριακών τιμών ΜΔΕ σε ανομοιογενή χωρία, με φυσικές ασυνέχειες και ασυνέχειες στις διεπαφές των υποχωρίων. Στη συνέχεια αναπτύχθηκαν αριθμητικές μέθοδοι και αριθμητικές τεχνικές που αντιμετωπίζουν αποτελεσματικά τις ασυνέχειες και είναι κατάλληλες για την υλοποίηση σε παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα. Τέλος, υλοποιήθηκαν αντίστοιχοι αλγόριθμοι, σε διάφορες υπολογιστικές πλατφόρμες (CPUs, GPUs, FEniCS) και παραδόθηκαν, έτοιμα προς χρήση, λογισμικά.
- Εφαρμόστηκε η καινοτόμος μαθηματική μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές και αναπτύχθηκαν λύσεις κλειστής μορφής ως προς τον χρόνο σε ευαίσθητα προβλήματα, όπως εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Σημαντικό ρόλο έπαιξε η συμμετοχή του κορυφαίου

επιστήμονα Καθηγητή Αθανασίου Φωκά ως μετακαλούμενου ερευνητή του εξωτερικού.

2. Την ανάπτυξη της διεπιστημονικής έρευνας.

Η έρευνα χαρακτηρίζεται ως διεπιστημονική αφού έχει αφετηρία υπαρκτά προβλήματα Περιβαλλοντολογικής Μηχανικής και Ιατρικής, αναπτύχθηκαν επιστημονικές περιοχές κυρίως της αριθμητικής επίλυσης προβλημάτων αρχικών ή συνοριακών τιμών ΜΔΕ που περιγράφουν τα προβλήματα αυτά και στη συνέχεια αναπτύχθηκαν σύγχρονες τεχνικές υλοποίησης από την Επιστήμη των Ηλεκτρονικών Υπολογιστών. Συμμετείχαν ερευνητές του επιστημονικών πεδίων των Εφαρμοσμένων Μαθηματικών, της Αριθμητικής Ανάλυσης και της Επιστήμης Ηλεκτρονικών Υπολογιστών.

3. Τη συνέργεια μεταξύ ερευνητικών ομάδων διαφορετικών Πανεπιστημίων.

Συνεργάστηκαν αρμονικά επιστήμονες τριών ερευνητικών ομάδων από διαφορετικά Πανεπιστήμια, το Πολυτεχνείο Κρήτης, το Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας και το Πανεπιστήμιο Πατρών.

- Η ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης ασχολήθηκε κυρίως με την επίλυση ΜΔΕ αναπτύσσοντας αριθμητικές μεθόδους, κυρίως μεθόδους Collocation για τη διακριτοποίηση, και με τη μέθοδο μετασχηματισμών Φωκά για την εύρεση λύσεων σε κλειστή μορφή. Συνεργάστηκε επιστημονικά και με τις δυο άλλες ομάδες.
- Η ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, στο αριθμητικό επίπεδο, εργάστηκε στην ανάπτυξη τεχνικών για τη χαλάρωση στις διεπαφές των υποχωρίων, όπου υπάρχουν ασυνέχειες, καθώς και με την ανάπτυξη στοχαστικών μεθόδων για την αντιμετώπιση προβλημάτων ασυνέχειας και συνεργάστηκε στο επίπεδο αυτό κυρίως με την ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης. Επίσης, συνεργαζόμενη κυρίως με την ομάδα του Πανεπιστημίου Πατρών, εργάστηκε στο επίπεδο υλοποίησης και ανάπτυξης παράλληλων υπολογιστικών τεχνικών και λογισμικού.
- Η ομάδα του Πανεπιστημίου Πατρών, εργάστηκε κυρίως στο επίπεδο της υλοποίησης των προτεινομένων αριθμητικών μεθόδων και την ανάπτυξη κατάλληλων παράλληλων υπολογιστικών περιβαλλόντων για την αποτελεσματική αντιμετώπιση του προβλήματος.

Οι συνεργασίες αυτές απέδωσαν άριστα αποτελέσματα.

4. Την ανάπτυξη συνεργασιών με ιδρύματα και ερευνητικά κέντρα της χώρας και του εξωτερικού.

Σημαντικότερη ήταν η συνεργασία με τον Καθηγητή Α. Φωκά του Πανεπιστημίου Cambridge, ως μετακαλούμενου Έλληνα ερευνητή του



προγράμματος ο οποίος συμμετείχε σε όλα τα αποτελέσματα της δράσης 2.4. Καθοριστική επίσης ήταν και η συνεργασία με τον ερευνητικό συνεργάτη Δ. Μαντζαβίνο του Πανεπιστημίου Notre Dame.

Επίσης, στα πλαίσια της Δράσης 3.2, η ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας ανέπτυξε συνεργασία με δύο πανεπιστήμια του εξωτερικού: με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Paololenne στο École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) στην Λωζάννη της Ελβετίας και με την ερευνητική ομάδα του καθηγητή Wu-chun Feng στο Virginia Tech στις ΗΠΑ.

Συμπερασματικά, το ερευνητικό αυτό πρόγραμμα πέτυχε στο ακέραιο τους στόχους που έθεσε: Παράχθηκε επιστημονικό έργο υψηλού επιπέδου το οποίο χαρακτηρίζεται από τη διεπιστημονικότητά του. Συνεργάστηκαν ερευνητές από τρία διαφορετικά Ανώτατα Ιδρύματα του εσωτερικού. Αναπτύχθηκαν συνεργασίες με Ιδρύματα του εξωτερικού κυρίως με τον μετακαλούμενο ερευνητή του οποίου ήταν καταλυτική η ενεργή του παρουσία. Ωφελήθηκαν, κυρίως νέοι ερευνητές από όλες τις ερευνητικές ομάδες. Παραδόθηκαν πολύ περισσότερα από τα προβλεπόμενα στην πρόταση παραδοτέα. Τέλος, η επιτελούμενη έρευνα και οι τεχνικές που αναπτύχθηκαν, έδωσαν νέα επιστημονικά θέματα που χρήζουν μελλοντικής έρευνας.

Οι αξιολογητές



Βραχάτης Μιχαήλ
Καθηγητής
Τμήμα Μαθηματικών
Πανεπιστήμιο Πατρών



Νούτσος Δημήτριος
Καθηγητής
Τμήμα Μαθηματικών
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων