

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 2.1

Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation

Περιεχόμενα

1 Σκοπός	3
1.1 Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις	3
1.2 Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις	4
1.3 Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις	4
1.4 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs	4
2 Μεθοδολογία	5
2.1 Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις	5
2.2 Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις	10
2.3 Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις	13
2.4 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs	16
2.4.1 Παράλληλος Αλγόριθμος	18
3 Αριθμητικά Αποτελέσματα Υλοποιήσεων	19
3.1 Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις	20
3.2 Αριθμητικά αποτελέσματα της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1+1 διαστάσεις	21
3.3 Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις	22
3.4 Αποτελέσματα Παράλληλης επίλυσης των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών GPUs	23
4 Παραδοτέα	24
5 Συνεργασίες	25
6 Μελλοντικές Δράσεις	25

1 Σκοπός

Σκοπός της δράσης 2.1, όπως προκύπτει από το ΤΔΥ, είναι η ανάπτυξη και μελέτη ορθογώνιων ή spline collocation μεθόδων για την επίλυση μη-κλασικών ΜΔΕ (multiphysics, multidomain) και η αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές, αλλά και η κατανόηση της επίδρασης των ασυνεχειών αυτών στην συμπεριφορά της μεθόδου collocation όσον αφορά τον βαθμό σύγκλισης και την ευστάθεια της μεθόδου, καθώς και της κατάστασης των αντίστοιχων γραμμικών συστημάτων. Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια δράσεων 3 και 4).

Στο παραπάνω πλαίσιο, συνεχίζοντας την ερευνητική δραστηριότητα που αναπτύξαμε τη προηγούμενη περίοδο και λαμβάνοντας υπόψιν τον προγραμματισμό του ερευνητικού έργου, οι βασικές ερευνητικές δραστηριότητες που αναπτύξαμε το έτος 2013 επικεντρώθηκαν στην προσαρμογή και επέκταση της μεθόδου Collocation με ασυνεχή κυβικά Hermite στοιχεία (dDHC) ώστε να μπορεί να επιλύει διευρυμένες κλάσεις ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων. Ο σκοπός και οι στόχοι που επετεύχθησαν την τρέχουσα περίοδο εξειδικεύονται και αναλύονται στις παραγράφους που ακολουθούν.

Παράλληλα βελτιώνεται η παράλληλη επαναληπτική επίλυση των εξισώσεων Hermite Collocation σε πολλαπλά γραφικά υποσυστήματα υπολογισμών (GPUs).

1.1 Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 1$ διαστάσεις

Με κύριο στόχο τη βελτίωση του μαθηματικού φορμαλισμού που αναπτύξαμε την προηγούμενη περίοδο, ώστε με περισσότερη ευκολία να μπορεί να προσαρμόζεται σε γενικότερες κλάσεις προβλημάτων, η μέθοδος dDHC προσαρμόστηκε και επεκτάθηκε σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών. Επίσης, για προβλήματα παραβολικού τύπου όπου απαιτείται και αρχική συνθήκη, κατασκευάστηκε κατάλληλη αρχική συνάρτηση που να ικανοποιεί την συνθήκη της συνέχειας της λύσης καθώς και την συνθήκη της ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου της.

1.2 Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις $1 + 1$ διαστάσεις

Με στόχο την ανάπτυξη του απαραίτητου μαθηματικού φορμαλισμού για την αντιμετώπιση μη-γραμμικών προβλημάτων πολλαπλών πεδίων αλλά και τη διεύρυνση των φυσικών προβλημάτων και εφαρμογών που μπορούν να επιλυθούν με την νέα μέθοδο dDHC που έχουμε αναπτύξει, την τρέχουσα περίοδο θεωρήσαμε την επίλυση ομογενών μη-γραμμικών ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων στις $1 + 1$ διαστάσεις όπου ο συντελεστής διάχυσης είναι συνεχής αλλά εξαρτάται γραμμικά από την ίδια τη συνάρτηση. Με τη χρήση γινομένων πινάκων τύπου Hadamard αναπτύχθηκε νέος φορμαλισμός για την αντιμετώπιση των μη γραμμικών όρων πολυωνυμικού τύπου.

1.3 Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 2$ διαστάσεις

Έχοντας αναπτύξει τον απαιτούμενο φορμαλισμό στις $1 + 1$ διαστάσεις ξεκινάμε την ανάπτυξη φορμαλισμού για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 2$ διαστάσεις με στόχο την επέκταση της dDHC μεθόδου για την αντιμετώπιση μιας διευρυμένης κλάσης ρεαλιστικών προβλημάτων. Τα αρχικά μας αποτελέσματα αφορούν ορθογώνιες γεωμετρίες με ασυνέχειες αποκλειστικά στην x -κατεύθυνση ή αποκλειστικά y -κατεύθυνση (τύπου stripes) ώστε να σχηματιστούν οι εξισώσεις με χρήση εξωτερικού γινομένου.

1.4 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs

Αντικείμενο αυτής της ερευνητικής δραστηριότητας είναι η μελέτη απεικόνισης των Hermite Collocation εξισώσεων, που προκύπτουν από ελλειπτικά προβλήματα συνοριακών τιμών, σε παράλληλες αρχιτεκτονικές που χρησιμοποιούν γραφικούς επιταχυντές GPUs. Σε παλαιότερη εργασίας μας, παρουσιάστηκε παράλληλος αλγόριθμος, στον οποίο γίνεται χρήση του συμπληρώματος Schur σε συνδυασμό με την επαναληπτική μέθοδο επίλυσης Bi-Conjugate Gradient Stabilized (BiCGSTAB) για πολυπύρηνες αρχιτεκτονικές με χρήση γραφικού υποσυστήματος (GPU). Στην ερευνητική διαδικασία, η χρήση του συγκεκριμένου αλγορίθμου επεκτείνεται σε αρχιτεκτονικές υψηλών επιδόσεων με χρήση πολλαπλών γραφικών υποσυστημάτων GPUs. Για την υλοποίηση του παράλληλου αλγορίθμου σε συγκεκριμένου τύπου αρχιτεκτονικές, απαιτείται υβριδικού τύπου διαχείριση της μνήμης λόγω της αρχιτεκτονικής των επιμέρους υλικών -

το γραφικό υποσύστημα αποτελεί σύστημα κατανεμημένης μνήμης ενώ οι πολλαπλοί πυρήνες του κεντρικού επεξεργαστή επικοινωνούν μέσω ενιαίας μνήμης. Η υλοποίηση του αλγορίθμου πραγματοποιήθηκε σε πολυπύρηνο μηχάνημα τύπου HP SL390, εξοπλισμένο με γραφικά υποσυστήματα τύπου Tesla M2070, με χρήση των προτύπων OpenMP και OpenACC. Οι χρόνοι εκτέλεσης που παρουσιάζονται φανερώνουν την αποδοτικότητα της παράλληλης εκτέλεσης.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 ενδεικτικά αριθμητικά αποτελέσματα ενώ στις επόμενες δύο αναφέρουμε τις συνεργασίες που προέκυψαν κατά τη διάρκεια του έτους καθώς και τους μελλοντικούς στόχους.

2 Μεθοδολογία

2.1 Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

Ως γνωστόν, το μοντέλο αναφοράς στις 1+1 διαστάσεις έχει τη μορφή:

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ c_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (1)$$

ή, ισοδύναμα, αντικαθιστώντας $c(x, t) = e^t u(x, t)$, στη μορφή:

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (2)$$

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει στις Τεχνικές Εκθέσεις των Δράσεων 2.1 & 4.2 έτους 2012, η συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x)$ είναι ασυνεχής και χαρακτηρίζει προβλήματα πολλαπλών πεδίων. Προς χάριν γενίκευσης και βελτίωσης του φορμαλισμού που έχουμε ήδη αναπτύξει, ως υποθέσουμε ότι έχουμε K διακριτά εσωτερικά σημεία διεπαφής w_k στο χωρίο $[a, b]$ που ορίζουν $K + 1$ διακριτές περιοχές διάχυσης. Δηλαδή υποθέτουμε:

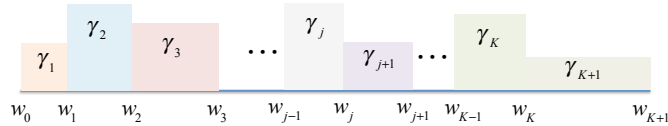
$$a = w_0 < w_1 < \dots < w_k < \dots < w_K < w_{K+1} = b,$$

και ορίζουμε τα υποχωρία

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) , \quad k = 1, \dots, K+1 . \quad (3)$$

έτσι ώστε

$$D(x) = \gamma_k \in \mathbb{R} \text{ for } x \in \mathcal{W}_k , \quad k = 1, \dots, K+1 . \quad (4)$$



Σχήμα 1: Ο συντελεστής διάχυσης D στα $K+1$ υποχωρία

Όπως και στο πρόβλημα με τις 3 περιοχές, έτσι και εδώ η παραβολική φύση της διαφορικής συνεπάγεται την συνέχεια της c , καθώς και των c_t , (Dc_x) . Και, καθώς ο D στην (4) είναι ασυνεχής, η c_x πρέπει να είναι επίσης κατάλληλα ασυνεχής, ώστε να προκύπτει η συνέχεια της (Dc_x) . Αυτές οι προϋποθέσεις οδηγούν στις παρακάτω συνθήκες μεταξύ των εσωτερικών σημείων διεπαφής w_k , $k = 1, \dots, K$:

$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow w_k^-} c(x, t) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} c(x, t) \\ \lim_{x \rightarrow w_k^-} D(x)c_x(x, t) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} D(x)c_x(x, t) \end{cases} . \quad (5)$$

Ας θεωρήσουμε τώρα μια ομοιόμορφη διαμέριση σε κάθε ένα από τα $k = 1, \dots, K+1$ κλειστά χωρία $\overline{\mathcal{W}}_k = [w_{k-1}, w_k]$ σε N_k υποδιαστήματα μήκους

$$h_k := \frac{w_k - w_{k-1}}{N_k} . \quad (6)$$

οπότε

$$[a, b] = \bigcup_{j=1}^{N+1} I_j , \quad I_j = [x_{j-1}, x_j] \quad (7)$$

με

$$x_j = a + j h_j(k) , \quad j = 0, \dots, N+1 , \quad (8)$$

όπου

$$N = \sum_{k=1}^{K+1} N_k \text{ and } h_j(k) = h_k \text{ when } I_j \subseteq \overline{\mathcal{W}}_k , \quad (9)$$

για $k = 1, \dots, K+1$.

Η μέθοδος DHC (cf. [20], [21], [22]) αναζητά προσεγγίσεις $u(x, t) \sim c(x, t)$ στη μορφή

$$u(x, t) = \sum_{j=0}^{N+1} [\alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x) + \alpha_{2j+1}(t)\phi_{2j+1}(x)] \quad (10)$$

όπου οι ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης Hermite $\phi_{2j}(x)$ και $\phi_{2j+1}(x)$, με κέντρα τον κόμβο x_j , ορίζονται ως εξής

$$\phi_{2j}(x) = \begin{cases} \phi\left(\frac{x_j - x}{h_j(k)}\right) & , \quad x \in I_j \\ \phi\left(\frac{x - x_j}{h_{j+1}(k)}\right) & , \quad x \in I_{j+1} \\ 0 & , \quad \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (11)$$

και

$$\phi_{2j+1}(x) = \begin{cases} -\frac{h_j(k)}{\gamma_j} \psi\left(\frac{x_j - x}{h_j(k)}\right) & , \quad x \in I_j \\ \frac{h_{j+1}(k)}{\gamma_{j+1}} \psi\left(\frac{x - x_j}{h_{j+1}(k)}\right) & , \quad x \in I_{j+1} \\ 0 & , \quad \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (12)$$

Οι συναρτήσεις $\phi(s)$ και $\psi(s)$ είναι τα κυβικά πολυώνυμα Hermite ορισμένα στο $[0, 1]$,

$$\phi(s) = (1 - s)^2(1 + 2s) \quad , \quad \psi(s) = s(1 - s)^2. \quad (13)$$

Στο Σχ. 2 παρακάτω, φαίνονται τα ασυνεχή πολυώνυμα Hermite μεταξύ αρκετών κόμβων που περιέχουν και ένα σημείο διεπαφής $x_i = w_k$.

Μπορεί τώρα να επαληθευθεί ότι,

$$u(x_j, t) = a_{2j}(t), \quad (14)$$

$$u_x(x_j, t) = \begin{cases} a_{2j+1}(t)/\gamma_j & , \quad \text{if } x_j \in I_j \wedge x_j \neq w_k \quad \forall k \\ a_{2j+1}(t)/\gamma_{j+1} & , \quad \text{if } x_j \in I_{j+1} \wedge x_j \neq w_k \quad \forall k \end{cases} \quad (15)$$

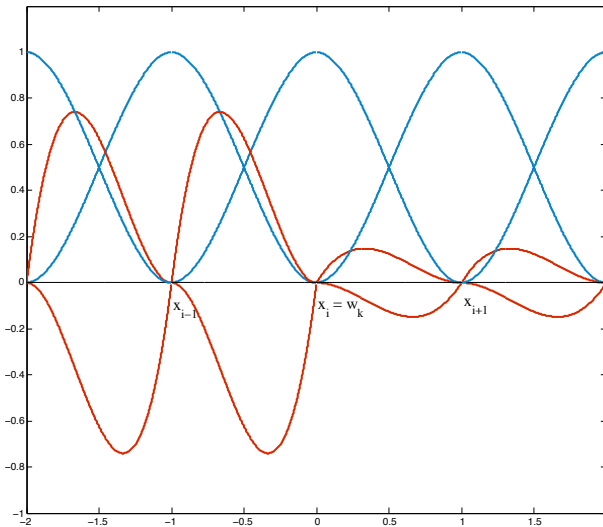
οπότε, για οποιοδήποτε $x_j = w_k$, ισχύει

$$\lim_{x \rightarrow w_k^-} \gamma_j u_x(x, t) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} \gamma_{j+1} u_x(x, t) \quad (16)$$

άρα, οι συνθήκες (5) ικανοποιούνται.

Θεωρώντας τα εσωτερικά σημεία Gauss σε κάθε στοιχείο I_j :

$$\sigma_{2j-1} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} - \frac{h_j}{2\sqrt{3}} \quad \text{and} \quad \sigma_{2i} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} + \frac{h_j}{2\sqrt{3}}. \quad (17)$$



Σχήμα 2: Ασυνεχής βάση Hermite μεταξύ των $x_i = w_k$

Αντικαθιστώντας τώρα, την προσεγγιστική λύση (10) στην διαφορική, και παρατηρώντας ότι κάθε I_j είναι στοιχείο με βαθμό ελευθερίας τέσσερα οι elemental εξισώσεις collocation μπορούν να γραφούν ως

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \dot{\alpha}_L(t) \phi_L(\sigma_i) = \gamma_j \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t) \phi_L''(\sigma_i) \quad (18)$$

για $i = 2j - 1$, $2j$ και φυσικά, $\dot{\alpha}_L(t) = \frac{d}{dt} \alpha_L(t)$ και $\phi_L''(x) = \frac{d}{dx} \phi_L(x)$.

Δουλεύοντας όπως στη ΤΕ 2012, οι elemental εξισώσεις του γραμμικού όρου $u^{(m)}(x, t)$ μπορούν να γραφούν στην εξής μορφή πίνακα:

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t) \phi_L^{(m)}(\sigma_i) = C_j^{(m)} \alpha_j, \quad i = 2j - 1, 2j, \quad (19)$$

όπου

$$C_j^{(m)} = \begin{bmatrix} A_j^{(m)} & B_j^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 2 \quad (20)$$

$$\alpha_j = \begin{bmatrix} \alpha_{2j-2}(t) & \alpha_{2j-1}(t) & \alpha_{2j}(t) & \alpha_{2j+1}(t) \end{bmatrix}^T \quad (21)$$

με

$$A_j^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

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

$$B_j^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

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

Επομένως, συνθέτοντας τα παραπάνω, το σύνολο των εξισώσεων μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$C^{(0)}\dot{\alpha} = \gamma C^{(2)}\alpha \quad (24)$$

όπου οι $(2N+2) \times (2N+2)$ πίνακες $C^{(m)}$ $m = 0, 1, 2$, γ ορίζονται από:

$$C_m = \begin{bmatrix} \tilde{A}_1^{(m)} & B_1^{(m)} & & & & \\ & A_2^{(m)} & B_2^{(m)} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & A_N^{(m)} & B_N^{(m)} \\ & & & & & A_{N+1}^{(m)} & \tilde{B}_{N+1}^{(m)} \end{bmatrix} \quad (25)$$

και

$$\gamma = \text{diag} [\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \cdots \gamma_N \gamma_N \gamma_{N+1}].$$

Επιπλέον, επιβεβαιώνεται ότι από τις συνοριακές συνθήκες Neumann συνεπάγεται ότι

$$\alpha_1(t) = \alpha_{2N+3}(t) = 0, \quad (26)$$

και

$$\dot{\alpha}_1(t) = \dot{\alpha}_{2N+3}(t) = 0. \quad (27)$$

Τα διανύσματα $\tilde{A}_1^{(k)}$ και $\tilde{B}_{N+1}^{(k)}$ είναι τα ανάλογα των $A_1^{(k)}$ και $B_{N+1}^{(k)}$, παραλείποντας την δεύτερη στήλη λόγω των συνοριακών συνθηκών.

Τέλος, έχουμε προσεγγίσει την αρχική συνθήκη με δύο διαφορετικές συναρτήσεις. Ειδικότερα, ορίσαμε μια συνάρτηση τύπου Dirac για πολλαπλές αρχικές πηγές,

$$f(x) = \sum_{i=1}^k \delta(x - \xi_i) \quad , \quad \xi \in [a, b] \quad , \quad (28)$$

και μια συνάρτηση που ικανοποιεί τις συνθήκες ασυνέχειας μεταξύ των διαφορετικών χωρίων,

$$f_k(x) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{[(x + \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} w_i) - \gamma(c + \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} w_i)]^2}{(\alpha\gamma)^2}} & , \quad k \text{ περιττός} \\ \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{[\gamma(x - c) + (1 - \gamma) \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} w_i]^2}{(\alpha\gamma)^2}} & , \quad k \text{ άρτιος} \end{cases}$$

2.2 Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις

Ένας τρόπος για να ενσωματωθεί η πυκνοεξαρτώμενη κινητικότητα ενός είδους, στην εξίσωση Fisher-Kolmogorov, ένα κλασσικό μοντέλο βιολογικής εισβολής, είναι να αντικατασταθεί ο σταθερός συντελεστής διάχυσης D με έναν πυκνοεξαρτώμενο $D(u)$. Υποθέτοντας ότι η διάχυση εξαρτάται γραμμικά από την πυκνότητα, δηλαδή $D(u) = \lambda_0 u + \lambda_1$, η γενικευμένη εξίσωση του Fisher μπορεί να πάρει την ακόλουθη μορφή:

$$u_t = [(\lambda_0 + \lambda_1 u)u_x]_x + \lambda_2 u - \lambda_3 u^2 \quad (29)$$

όπου $u \equiv u(x, t)$, $x \in [a, b]$, $t \in [0, T]$ και $\lambda_i \in \mathbf{R}$, για $i = 0, 1, 2, 3$, με $\lambda_2 \lambda_3 > 0$, ενώ έχουν τεθεί συνοριακές συνθήκες τύπου Neumann $u_x(a, t) = 0$ και $u_x(b, t) = 0$ καθώς και μια αρχική κατανομή της πυκνότητας $u(x, 0) = f(x)$. Υπάρχουσες αναλυτικές λύσεις που έχουν βρεθεί βοηθούν στην μελέτη της συμπεριφοράς των αριθμητικών λύσεων και στο καθορισμό της τάξης σύγκλισης της μεθόδου.

Μία γενικότερη κλάση μη-γραμμικών προβλημάτων περιγράφεται από την Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov (KPP) εξίσωση

$$u_t = \mathcal{L}[u] := [(\lambda_0 + \lambda_1 u)u_x]_x + \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} u^k \quad , \quad (30)$$

την οποία και θα χρησιμοποιήσουμε στη παρούσα έκθεση για την παραγωγή του μαθηματικού formalismού.

Θεωρώντας μια επαρκώς ομαλή λύση της εξίσωσης (30), μια ομοιόμορφη διαμέριση του $[a, b]$ σε N υποδιαστήματα, με βήμα $h = (b - a)/N$ και κόμβους $x_j := a + jh$, $j = 1, \dots, N + 1$, η μέθοδος Hermite Collocation επιδιώκει $O(h^4)$ προσεγγίσεις της μορφής:

$$U(x, t) = \sum_{j=1}^{N+1} [\alpha_{2j-1}(t)\phi_{2j-1}(x) + \alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x)] \quad (31)$$

όπου $\phi_{2j-1}(x)$ και $\phi_{2j}(x)$ είναι οι συνεχείς συναρτήσεις βάσης Hermite και ορίζονται φυσικά από τις σχέσεις (11)-(12) με $\gamma_j = 1$ και $h_j(k) = h$ για όλα τα j .

Η αντικατάσταση της προσεγγιστικής λύσης (31) στην εξίσωση (30) παράγει το **υπόλοιπο**:

$$\mathcal{R}(x, t) := U_t - [(\lambda_0 U + \lambda_1)U_x]_x - \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} U^k. \quad (32)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα τα σημεία Gauss ως εσωτερικά σημεία Collocation μπορούμε να αποδείξουμε ότι οι εξισώσεις Collocation σε κάθε στοιχείο γράφονται στη μορφή:

$$\begin{aligned} \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \dot{\alpha}_\ell(t) \phi_\ell(\sigma_i) &= \left(\lambda_0 + \lambda_1 \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell(\sigma_i) \right) \\ &\cdot \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell''(\sigma_i) \\ &+ \lambda_1 \left(\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell'(\sigma_i) \right)^2 \\ &+ \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} \left(\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell(\sigma_i) \right)^k. \end{aligned} \quad (33)$$

Για να παράξουμε την αντίστοιχη εξίσωση σε μορφή πινάκων, όπως και στην προηγούμενη παράγραφο, θέτουμε

$$\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_\ell(t) \phi_\ell^{(m)}(\sigma_i) |_{i=2j-1, 2j} = C_j^{(m)} \alpha_j, \quad (34)$$

όπου

$$C_j^{(m)} = \begin{bmatrix} A_j^{(m)} & B_j^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, 2 \quad (35)$$

$$\alpha_j = \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1}(t) & \alpha_{2j}(t) & \alpha_{2j+1}(t) & \alpha_{2j+2}(t) \end{bmatrix}^T \quad (36)$$

με

$$A_j^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h^m} \begin{cases} \begin{bmatrix} s_1^{(m)} & hs_2^{(m)} \\ s_3^{(m)} & -hs_4^{(m)} \end{bmatrix}, & m = 0, 2 \\ \begin{bmatrix} s_1^{(m)} & hs_2^{(m)} \\ s_1^{(m)} & hs_4^{(m)} \end{bmatrix}, & m = 1 \end{cases} \quad (37)$$

$$B_j^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j+2}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j+2}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h^m} \begin{cases} \begin{bmatrix} s_3^{(m)} & hs_4^{(m)} \\ s_1^{(m)} & -hs_2^{(m)} \end{bmatrix}, & m = 0, 2 \\ \begin{bmatrix} s_3^{(m)} & hs_4^{(m)} \\ s_3^{(m)} & hs_2^{(m)} \end{bmatrix}, & m = 1 \end{cases} \quad (38)$$

και

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

Αποδεικνύοντας, επιπλέον, ότι οι Collocation εξισώσεις στοιχείου για έναν γενικό μη-γραμμικό όρο της μορφής

$$u^{(m)}(x, t)u^{(n)}(x, t), \quad m, n = 0, 1, 2$$

μπορούν να εκφραστούν ως το γινόμενο πινάκων κατά Hadamard

$$\left(C_j^{(m)} \alpha_j\right) \circ \left(C_j^{(n)} \alpha_j\right), \quad (39)$$

οι Collocation εξισώσεις στοιχείου σε μορφή πινάκων παίρνουν τη μορφή:

$$\begin{aligned} C_j^{(0)} \dot{\alpha}_j &= \lambda_0 C_j^{(2)} \alpha_j + \lambda_1 \left(C_j^{(0)} \alpha_j \right) \circ \left(C_j^{(2)} \alpha_j \right) \\ &+ \lambda_1 \left(C_j^{(1)} \alpha_j \right) \circ \left(C_j^{(1)} \alpha_j \right) \\ &+ \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} \left(C_j^{(0)} \alpha_j \right)^{\circ k} . \end{aligned} \quad (40)$$

Επομένως, συνθέτοντας τα παραπάνω, το σύνολο των εξισώσεων μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$\begin{aligned} C_0 \dot{\alpha} &= \lambda_0 C_2 \alpha \\ &+ \lambda_1 (C_1 \alpha \circ C_1 \alpha + C_0 \alpha \circ C_2 \alpha) \\ &+ \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} (C_0 \alpha)^{\circ k} \end{aligned} \quad (41)$$

όπου οι $(2N+2) \times (2N+2)$ πίνακες C_m , $m = 0, 1, 2$ έχουν την μορφή (25).

Επισημαίνουμε ότι το Collocation μη-γραμμικό σύστημα ΣΔΕ που ορίζεται στη σχέση (41) μπορεί τώρα να συνδυαστεί με SSP Runge-Kutta σχήματα υψηλής τάξης για επιτευχθεί επιτυχώς η λύση του και να διερευνηθεί και η τάξη σύγκλισης των σχημάτων. Αυτό γίνεται ενδεικτικά στη Παράγραφο 3 καθώς και στη Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.2 όπου και επιβεβαιώνεται η τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου Collocation.

2.3 Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις

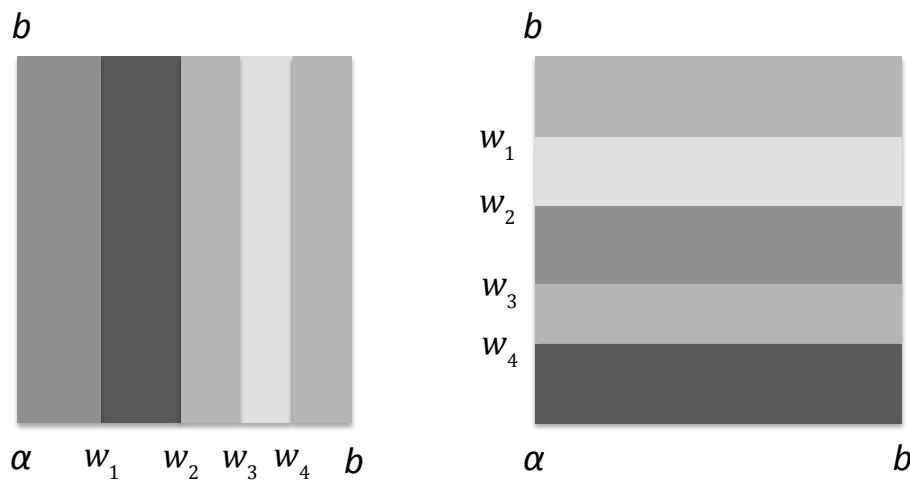
Για να αναπτύξουμε τον απαραίτητο φορμαλισμό στις 1+2 διαστάσεις ας θεωρήσουμε κατ' αρχήν το στοιχειώδες γραμμικό μοντέλο Προβλήματος Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών (ΠΑΣΣ) Διάχυσης-Αντίδρασης:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot (D \nabla c) + c \quad , \quad (x, y) \in [a, b]^2, \quad 0 \leq t \leq T \\ c(0, x, y,) &= f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \end{aligned}$$

όπου φυσικά $c := c(t, x, y,)$, το οποίο βεβαίως μετά τον κλασικό εκθετικό μετασχηματισμό $c \leftarrow e^t c$ γράφεται ισοδύναμα και ως

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot (D \nabla c) \quad , \quad (x, y) \in [a, b]^2, \quad 0 \leq t \leq T \\ c(0, x, y,) &= f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0. \end{aligned} \quad (42)$$

Η περίπτωση ενδιαφέροντος, τον φορμαλισμό της οποίας αναπτύξαμε την τρέχουσα περίοδο, χαρακτηρίζεται από το γεγονός ότι ο συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x, y)$ παρουσιάζει ασυνέχειες αποκλειστικά στην x -κατεύθυνση ή αποκλειστικά y -κατεύθυνση (τύπου stripes). Οι περιπτώσεις αυτές σχηματικά απεικονίζονται στο σχήμα Σχ. (3) για καλλίτερη κατανόηση.



Σχήμα 3: Χωρία Stripes και στις δύο διευθύνσεις.

Χωρίς να βλάπτεται η γενικότητα, ας υποθέσουμε ότι έχουμε K διαφορετικές γραμμές διεπαφής $x = w_k$, όλες κάθετες στην x διεύθυνση, στο χωρίο $[a, b]^2$ όπου δημιουργούν $K + 1$ διαφορετικές περιοχές διάχυσης. Πιο συγκεκριμένα, θεωρώντας τη διαμέριση

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

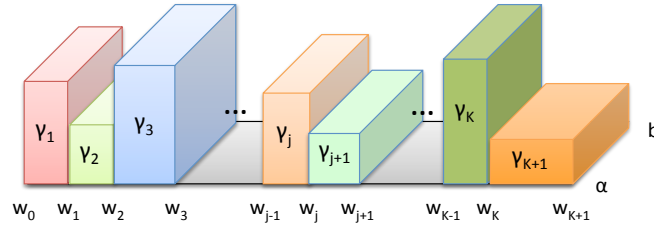
και τα αντίστοιχα πεδία

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) \times (a, b), \quad k = 1, \dots, K + 1, \quad (43)$$

ο συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x, y)$ καθορίζεται από την σχέση

$$D(x, y) = \gamma_k \in \mathbb{R} \quad \text{για} \quad (x, y) \in \mathcal{W}_k, \quad k = 1, \dots, K + 1. \quad (44)$$

Παρατηρούμε τώρα, ότι, η παραβολική φύση της διαφορικής συνεπάγεται τη συνέχεια της c , όπως φυσικά στις c_t και (Dc_x) . Αφού ο D (βλ. 44) είναι ασυνεχής στη x κατεύθυνση, η c_x πρέπει να είναι επίσης ασυνεχής, ώστε το γινόμενο (Dc_x) να είναι συνεχής. Σε αυτό το σημείο πρέπει να αναφέρουμε ότι, αφού ο D είναι συνεχής στην y κατεύθυνση τότε η c_y και η Dc_y είναι συνεχείς συναρτήσεις. Αυτές



Σχήμα 4: Ο συντελεστής διάχυσης D για τα $K + 1$ πεδία για το πρόβλημα τύπου stripes στη x -διεύθυνση.

οι συνθήκες ορίζουν τις σχέσεις που πρέπει να ισχύουν στις γραμμές διεπαφής w_k , $k = 1, \dots, K$:

$$\lim_{x \rightarrow w_k^-} c(t, x, y) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} c(t, x, y) \quad (45)$$

$$\lim_{x \rightarrow w_k^-} D(x, y) c_x(t, x, y) = \lim_{x \rightarrow w_k^+} D(x, y) c_x(t, x, y).$$

Ας θεωρήσουμε τώρα μια ομοιόμορφη διαμέριση σε καθένα από τα $k = 1, \dots, K + 1$ κλειστά χωρία $[w_{k-1}, w_k]$ από N_{x_k} υποδιαστήματα μήκους

$$h_{x_k} := \frac{w_k - w_{k-1}}{N_{x_k}}, \quad (46)$$

και N_y υποδιαστήματα μήκους

$$h_y := \frac{b - a}{N_y}. \quad (47)$$

Οπότε,

$$[a, b]^2 = \bigcup_{i=1}^{N_{x_k}+1} \bigcup_{j=1}^{N_y+1} I_{ij}, \quad I_{ij} = I_i^x \times I_j^y \quad (48)$$

με

$$\begin{aligned} I_i^x &= [x_{i-1}, x_i], \quad I_j^y = [y_{j-1}, y_j] \\ x_i &= a + i h_x(k), \quad i = 0, \dots, N + 1, \\ y_j &= a + j h_y, \quad j = 0, \dots, N_y + 1, \end{aligned} \quad (49)$$

όπου

$$N = \sum_{k=1}^{K+1} N_k \text{ and } h_i(k) = h_{x_k} \text{ when } I_i^x \subseteq [w_{k-1}, w_k], \quad (50)$$

για $k = 1, \dots, K + 1$.

Η μέθοδος dDHC αναζητά προσεγγίσεις $u(t, x, y) \sim c(t, x, y)$ της μορφής

$$u(t, x, y) = \sum_{i=0}^{2N+1} \sum_{j=0}^{2N_y+1} \alpha_{i,j}(t) \Phi_{i,j}(x, y) \quad (51)$$

όπου οι *derivative discontinuous Hermite bicubic* συναρτήσεις βάσης $\Phi_{i,j}(x, y)$ ορίζονται ως

$$\Phi_{i,j}(x, y) = \phi_i(x; \gamma_k) \phi_j(y; 1) \quad (52)$$

με $\phi_i(x; \gamma_k)$ να συμβολίζουν τα ασυνεχή Hermite κυβικά πολυώνυμα, όπως ορίστηκαν στις σχέσεις (11)-(12), και $\phi_j(y; 1)$ να συμβολίζουν τα συνεχή Hermite κυβικά πολυώνυμα, δηλ. όπως ορίστηκαν στις σχέσεις (11)-(12) αλλά με $\gamma_k = 1$. Όπως έχουμε ήδη εξηγήσει αναλυτικά στη μονοδιάστατη περίπτωση, στους όρους $u(t, x)$, $u_x(t, x)$ και $u_{xx}(t, x)$ αντιστοιχούν οι Collocation πίνακες C_0 , C_1 και C_2 αντίστοιχα. Εδώ, χρησιμοποιώντας το συμβολισμό $\tilde{C}_m$ για να συμβολίσουμε τους πίνακες που προέρχονται από τα ασυνεχή Hermite πολυώνυμα στη x -κατεύθυνση και C_m για να συμβολίσουμε τους πίνακες που προέρχονται από τα συνεχή Hermite πολυώνυμα στη y -κατεύθυνση, αποδείξαμε (γενικεύοντας τον σχετικό φορμαλισμό του Tensor Product Collocation) ότι μπορούμε να γράψουμε το σύστημα ΣΔΕ που προκύπτει από τη διακριτοποίηση του ΠΑΣΣ (43) στη μορφή:

$$A_{\tilde{0}0} \dot{\mathbf{a}} = A_{\tilde{2}0} \mathbf{a} + A_{\tilde{0}2} \mathbf{a}$$

όπου

$$A_{\tilde{m}n} = \tilde{C}_m \otimes C_n .$$

Αξίζει να σημειώσουμε ότι στην περίπτωση όπου οι γραμμές διεπαφής ήταν κάθετες στον άξονα y/y τότε είναι εύκολο κανείς να παρατηρήσει ότι το αντίστοιχο σύστημα που θα προκύψει είναι της μορφής:

$$A_{0\tilde{0}} \dot{\mathbf{a}} = A_{2\tilde{0}} \mathbf{a} + A_{0\tilde{2}} \mathbf{a}$$

Δηλαδή οι πίνακες με τα ασυνεχή πολυώνυμα Hermite θα είναι αυτοί που αντιστοιχούν στην y διεύθυνση.

2.4 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs

Η μέθοδος διακριτοποίησης Collocation είναι μια γνωστή μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων υψηλής τάξης ακρίβειας, βασισμένη στα πολυώνυμα Hermite

bi-cubic, που χρησιμοποιείται στην επίλυση ελλειπτικών Προβλημάτων Συνοριακών Τιμών (BVPs) (βλέπε [51, 44, 46]).

Με την εφαρμογή της μεθόδου σε τετράγωνα χωρία, και με χρήση ομοιόμορφης $n_s \times n_s$ διαμέρισης και κατάλληλης αριθμησης αγνώστων και εξισώσεων με τη μέθοδο red-black ([45]), το παραγόμενο Collocation red-black γραμμικό σύστημα $Ax = b$ είναι στη μορφή [35],

$$\begin{bmatrix} D_R & H_B \\ H_R & D_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_R \\ x_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_R \\ b_B \end{bmatrix} \quad (53)$$

όπου οι πίνακες D_R και D_B είναι block διαγώνιοι και ομαλοί (βλέπε [49]). Το μεγάλο μέγεθος του γραμμικού συστήματος, ειδικά σε περιπτώσεις πυκνής διακριτοποίησης, αυξάνει τον απαιτούμενο χώρο αποθήκευσης των δεδομένων και ταυτόχρονα, υποδεικνύει τη χρήση επαναληπτικής μεθόδου [42, 50] για την αποδοτική επίλυση σε παράλληλα υπολογιστικά συστήματα [52, 46, 47, 48]. Η προρυθμισμένη επαναληπτική μέθοδος BiCGSTAB ([34]) είναι μια αποδοτική μέθοδος επίλυσης για Collocation) γραμμικά συστήματα (53), σε υψηλών επιδόσεων παράλληλες αρχιτεκτονικές [47, 52, 48]. Στην [53] παρουσιάστηκε ένας νέου τύπου επιλύτης με χρήση του συμπληρώματος Schur για πολυπύρηνες αρχιτεκτονικές με χρήση γραφικού υποσυστήματος (GPU). Στη μέθοδο προσεγγίζονται επαναληπτικά μόνο οι black άγνωστοι και από αυτούς υπολογίζονται άμεσα οι κόκκινοι άγνωστοι. Καθότι βασίζεται στην εφαρμογή τεχνικής προρύθμισης στο γραμμικό σύστημα (53), σε 2 φάσεις, η επαναληπτική διαδικασία του αλγορίθμου για την επίλυση του γραμμικού συστήματος του συμπληρώματος Schur περιλαμβάνει επιλύτη δίχως προρύθμιση. Για το λόγο αυτό επιλέγεται η μέθοδος BiCGSTAB, για τον υπολογισμό των μαύρων αγνώστων. Λαμβάνοντας υπόψη ότι αυτό είναι το πλέον δαπανηρό υπολογιστικά μέρος της διαδικασίας επίλυσης - συγκεκριμένα, οι δύο πολλαπλασιασμοί που εμπλέκουν το συμπλήρωμα του Schur του πίνακα για κάθε επαναληπτικό βήμα της BiCGSTAB - επιλέγουμε ένα σημαντικό μέρος των παράλληλων υπολογισμών για αυτούς τους πολλαπλασιασμούς να πραγματοποιούνται σε γραφικά υποσυστήματα προκειμένου να επιτευχθεί επιτάχυνση της επίλυσης. Για την περίπτωση υλοποίησης του αλγορίθμου σε συστήματα με ένα γραφικό υποσύστημα, έχει ήδη παρουσιαστεί ο αλγόριθμος και το μοντέλο διαχείρισης μνήμης. Σε περίπτωση όμως που υπάρχει δυνατότητα χρήσης περισσοτέρων από ένα γραφικών υποσυστημάτων, είναι επιβεβλημένη μια διαφορετικού τύπου υβριδική διαχείριση της μνήμης, δεδομένου ότι κάθε υποσύστημα αποθηκεύει δεδομένα στην τοπική του μνήμη και επιπλέον, με δεδομένη την ιδιαίτερη δομή των πινάκων H_R και H_B , προκύπτει εξάρτηση δεδομένων σε κάθε πολλαπλασιασμό πίνακα με διάνυσμα. Η επόμενη παράγραφος παρουσιάζει τον υβριδικό αλγόριθμο, που βασίζεται σε ένα κοινής-κατανεμημένης μνήμης μοντέλο, που απαιτείται σε περίπτωση χρήσης πολλαπλών γραφικών υποσυστημάτων (GPUs).

2.4.1 Παράλληλος Αλγόριθμος

Ο παράλληλος αλγόριθμος για αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης στην [53] βασίζεται σε συγκεκριμένη αντιστοίχιση των αγνώστων σε CPU/GPU υπολογιστικά νήματα επιτρέποντας ομοιόμορφη κατανομή υπολογιστικού φόρτου για τους πυρήνες, ελαχιστοποιώντας το κόστος επικοινωνίας μεταξύ νημάτων και κοινής μνήμης και επιπλέον εκμηδενίζοντας το φαινόμενο idle core κατά τη διάρκεια της παράλληλης διαδικασίας.

Ακολουθώντας την ίδια αντιστοίχιση αγνώστων σε περίπτωση N πλήθους διαθέσιμων γραφικών υποσυστημάτων και για άρτιο $k = \frac{n_s}{N}$, οι παράλληλες διαδικασίες πολλαπλασιασμού πίνακα διάνυσμα $t = H_R z$ και $q = H_B s$ πρέπει να χρησιμοποιήσουν GPU και CPU υπολογιστικά νήματα για την αποφυγή πολλαπλών μεταφορών δεδομένων μεταξύ της CPU μνήμης και της αντίστοιχης της GPU. Οι υπολογιστικοί πυρήνες κάθε GPU $j = 1, \dots, N$ υπολογίζουν τα μέρη των διανυσμάτων t_l και q_l με $l = (j-1)k+1, \dots, jk$ τον αριθμό των υποδιανυσμάτων διάστασης $2n_s$. Για τον υπολογισμό στην j th GPU, των υποδιανυσμάτων $t_{(j-1)k+1}, t_{(j-1)k+2}, t_{jk-1}, t_{jk}, q_{(j-1)k+1}$ και q_{jk} απαιτούνται τα υποδιανύσματα $z_{(j-1)k}, z_{jk+1}, s_{(j-1)k-1}, s_{(j-1)k}, s_{jk+1}$ και s_{jk+2} , τα οποία είναι αποθηκευμένα στη τοπική μνήμη των $j-1$ και $j+1$ GPUs. Για αυτό το λόγο, οι συγκεκριμένες διαδικασίες εκτελούνται από υπολογιστικούς πυρήνες του CPU, όπου επίσης είναι αποθηκευμένα.

Ο παράλληλος αλγόριθμος Νο 1 (βλέπε Σχήμα 5) υλοποιεί τα προαναφερόμενες διαδικασίες και παρουσιάζει τον $t = H_R z$ GPU/CPU πολλαπλασιασμό πίνακα με διάνυσμα. Ο GPU/CPU πολλαπλασιασμός πίνακα με διάνυσμα

```

!$OMP PARALLEL
     $k = \frac{n_s}{N}$ 
    call acc_device_num(j, acc_device_nvidia)
!$ACC KERNELS COPYIN( $z((j-1)k+1 : jk)$ ) COPYOUT( $t((j-1)k+1 : jk)$ )
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do  $l = (j-1)k+1$  to  $jk$ 
        Η  $j$  GPU υπολογίζει  $t_l$ 
    enddo
!$ACC END KERNELS
!$OMP SECTION
    Το  $j$  CPU υπολογιστικό νήμα υπολογίζει  $t_{(j-1)k+1}, t_{(j-1)k+2}, t_{jk-1}, t_{jk}$ 
!$OMP END SECTION
!$OMP END PARALLEL

```

Σχήμα 5: Παράλληλος αλγόριθμος Νο 1.

$q = H_B s$ μπορεί να περιγραφεί με τον παράλληλο αλγόριθμο No 2 (βλέπε Σχήμα 6). Σημειώνεται ότι, για την αποδοτική υλοποίηση του παραπάνω αλ-

```

!$OMP PARALLEL
     $k = \frac{n_s}{N}$ 
    call acc_device_num(j, acc_device_nvidia)
!$ACC KERNELS COPYIN(s((j-1)k+1 : jk)) COPYOUT(q((j-1)k+1 : jk))
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do l = (j-1)k+1 to jk
        H j GPU υπολογίζει  $q_l$ 
    enddo
!$ACC END KERNELS
!$OMP SECTION
    To j CPU υπολογιστικό νήμα υπολογίζει  $q_{(j-1)k+1} , q_{jk}$ 
!$OMP END SECTION
!$OMP END PARALLEL

```

Σχήμα 6: Παράλληλος αλγόριθμος No 2.

γορίθμου πρέπει να είναι διαθέσιμα τουλάχιστον N CPU υπολογιστικά νήματα, τα οποία ουσιαστικά διαχειρίζονται τις GPUs. Συγκεκριμένα, κάθε ένα από τα νήματα φορτώνει τα απαραίτητα δεδομένα από τη κοινή μνήμη του CPU και τα μεταφέρει στην αντίστοιχη τοπική μνήμη της GPU. Όταν ολοκληρωθούν όλοι οι υπολογισμοί στη συγκεκριμένη GPU, το ίδιο CPU νήμα μεταφέρει τα δεδομένα από την τοπική μνήμη της GPU στην μνήμη του CPU. Η διαδικασία αυτή περιγράφεται παραπάνω εντός της OMP PARALLEL διαδικασίας. Η υπορουτίνα acc_device_num του προτύπου OpenACC αναλαμβάνει την αντιστοίχιση κάθε GPU σε ένα από τα CPU υπολογιστικά νήματα που έχει εκτελούν μέσα στην OMP parallel region.

3 Αριθμητικά Αποτελέσματα Υλοποιήσεων

Τα αποτελέσματα της μελέτης των μεθόδων που περιγράφονται στην παρούσα Τεχνική Έκθεση, παρουσιάζονται αναλυτικά στην Τεχνική Έκθεση 4.2 Έτος 2013, όσον όμως αφορά τις εξισώσεις Collocation παρουσιάζουμε ένα απλό πρόβλημα όπου επιβεβαιώνεται η τέταρτη τάξη σύγκλισης της dDHC.

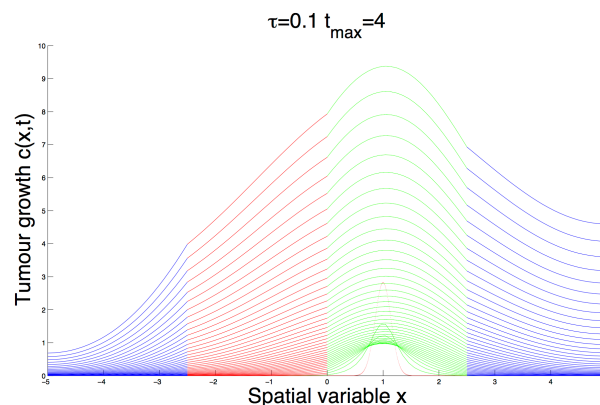
3.1 Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

Ανακαλώντας το ΠΑΣΣ (1) θεωρούμε το μοντέλο με τις εξής τιμές το παραμέτρων:

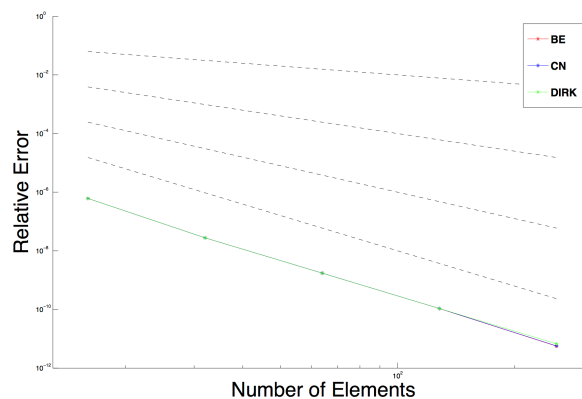
$$a = -5, w_1 = -2.5, w_2 = 0, w_3 = 2.5, b = 5, \gamma = 0.5$$

και $f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}} e^{-(x-1)^2/\eta^2}$, με $\eta = 0.2$.

Για την διακριτοποίηση στο χρόνο χρησιμοποιήθηκαν σχήματα DIRK (βλ. Τε-



Σχήμα 7: Η αριθμητική λύση της εξίσωσης.



Σχήμα 8: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων.

χνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2013) και η τάξη σύγκλισης της Collocation σε όλες τις περιπτώσεις διατηρείται τετάρτη.

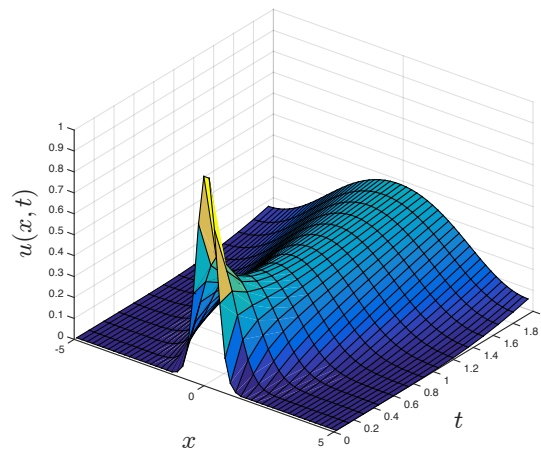
3.2 Αριθμητικά αποτελέσματα της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις

Το πρόβλημα μοντέλο που χρησιμοποιούμε έχει τη μορφή:

$$u_t = \left[\left(\frac{1}{10}u + 1 \right) u_x \right]_x + u - u^2 - 2u^3$$

$$u_x(-5, t) = 0, \quad u_x(5, t) = 0, \quad u(x, 0) = \frac{1}{0.4\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{0.4}\right)^2}.$$

Τα αριθμητικά αποτελέσματα συνοψίζονται στο σχήμα Σχ.?? και στον Πίνακα III που ακολουθούν.



Σχήμα 9: Απεικόνιση της αριθμητικής λύσης

TABLE III Computational Performance of HC-RK schemes

	Error Norm $\mathcal{E}_\infty$	Collocation's O.o.C.	Time (sec) needed to reach $t = 2$	
h	SSP(4,3)/(3,3)	SSP(4,3)/(3,3)	SSP(4,3)	SSP(3,3)
1/4	1.72e-05	-	0.18	0.27
1/8	1.26e-06	3.77	0.78	1.20
1/16	8.17e-08	3.94	3.93	6.17
1/32	5.15e-09	3.98	23.03	36.14
1/64	3.24e-10	3.98	147.29	252.05

Για την διακριτοποίηση στο χρόνο χρησιμοποιήθηκαν σχήματα SSPRK (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2013) και η τάξη σύγκλισης της Collocation σε όλες τις περιπτώσεις διατηρείται τετάρτη.

3.3 Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις

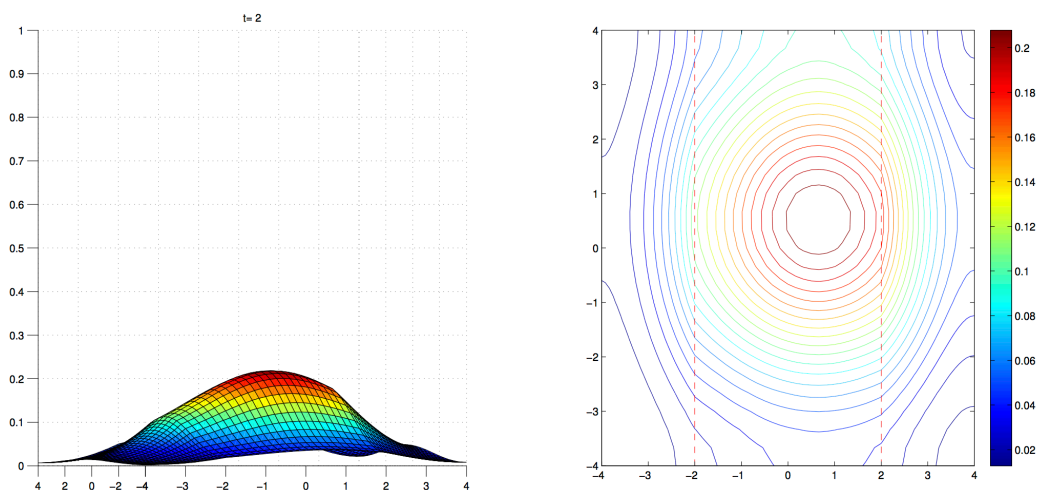
Θεωρούμε την εξίσωση

$$\begin{aligned}\frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot [D \nabla(c)] + c, \quad c := c(x, y, t) \\ (x, y) &\in [a, b]^2, \quad 0 \leq t \leq 2 \\ c(x, y, 0) &= f(x, y), \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0\end{aligned}$$

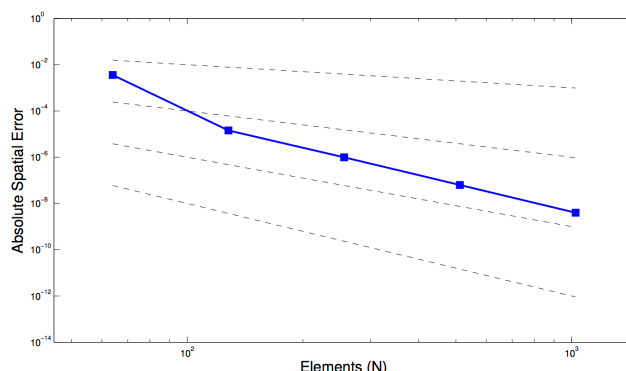
όπου

$$D = \begin{cases} 0.2 & , (x, y) \in [-4, -2] \times [-4, 4] \\ 1 & , (x, y) \in (-2, 2) \times (-2, 2) \\ 0.2 & , (x, y) \in [2, 4] \times [-4, 4] \end{cases}$$

Όπως μπορεί κανείς εύκολα να παρατηρήσει στο Σχ. 10, διακρίνονται οι διαφορετικές περιοχές στο χωρίο όπου στις γραμμές διεπαφής σχηματίζεται η ασυνεχής πρώτη παράγωγος της λύσης. Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει στο τέσσερα (Σχ. 11) ενώ ο υπολογιστικός χρόνος επίλυσης της εξίσωσης αυξάνει πολυωνυμικά.



Σχήμα 10: Αριθμητική Λύση του προβλήματος τύπου Stripes σε 2+1 διαστάσεις



Σχήμα 11: Τάξη Σύγκλισης

3.4 Αποτελέσματα Παράλληλης επίλυσης των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών GPUs

Το κοινής μνήμης υπολογιστικό μηχάνημα HP SL390s G7 διαθέτει ένα 6-πύρηνιο επεξεργαστή τύπου Xeon X5660@2.8GHz με 12 MB Level 3 μνήμη ταχείας προσπέλασης. Η συνολική μνήμη είναι 24 GB και το λειτουργικό σύστημα είναι Oracle Linux έκδοσης 6.2. Διαθέτει επίσης 2 γραφικά υποσυστήματα Tesla M2070 αρχιτεκτονικής Fermi ([37]), συνδεδεμένα μέσω PCI-e gen2 θυρών. Κάθε γραφικό υποσύστημα διαθέτει 6 GB μνήμης και 448 πυρήνες, ομαδοποιημένους σε 14 πολυεπεξεργαστές. Η εφαρμογή έχει υλοποιηθεί σε κώδικα Fortran διπλής ακρίβειας με χρήση των προτύπων OpenMP ([43, 40]) και OpenACC ([41]) με μεταγλωτιστή της εταιρείας PGI ([38]), έκδοσης 12.9. Επίσης, για τη πράξεις γραμμικής άλγεβρας χρησιμοποιούνται υποπρογράμματα από τις επιστημονικές βιβλιοθήκες BLAS και LAPACK ([39]).

Για την εκτέλεση του παραπάνω αλγορίθμου χρησιμοποιείται το πρόβλημα Dirichlet modified Helmholtz, το οποίο δέχεται την παρακάτω αναλυτική λύση

$$u(x, y) = 10 \phi(x) \phi(y), \quad \phi(x) = e^{-100(x-0.1)^2} (x^2 - x),$$

με τιμή της παραμέτρου $\lambda = 1$. Για τη διερεύνηση της απόδοσης του αλγορίθμου γίνεται χρήση ενός CPU υπολογιστικού νήματος σε περίπτωση εκτέλεσης αποκλειστικά στο CPU, ενώ για CPU/GPU υλοποιήσεις το πλήθος των CPU νημάτων είναι ίσο με το πλήθος των διαθέσιμων GPUs. Επιλύονται διάφορα προβλήματα μεγέθους από $n_s = 256$ μέχρι έως και 2048 πεπερασμένα στοιχεία σε κάθε χωρική κατεύθυνση. Το σύνολο των βαθμών ελευθερίας για κάθε πρόβλημα είναι $16n_s^2$, καθώς κάθε πεπερασμένο στοιχείο Hermite Collocation έχει 16 βαθμούς ελευθερίας. Για παράδειγμα, στη περίπτωση της πλέον πυκνής διακριτοποίησης, το σύνολο των βαθμών ελευθερίας ξεπερνά τα 67 εκατομμύρια.

Ο πίνακας 1 παρουσιάζει το συνολικό χρόνο υπολογισμών σε secs και τις μετρήσεις της επιτάχυνσης (speedup) με χρήση μόνο CPU αρχικά, CPU και μιας GPU στη συνέχεια και CPU με δύο GPUs τελικά, για όλα τα μεγέθη προβλημάτων.

Πίνακας 1: Speedup και χρόνοι εκτέλεσης σε seconds.

n_s	CPU time	CPU + GPU time	speedup	CPU + 2GPUs time	speedup
256	12.24	11.18	1.09	8.58	1.42
512	88.83	71.25	1.25	54.61	1.63
1024	750.35	549.82	1.37	399.42	1.88
2048	9176.02	6770.11	1.36	5209.01	1.76

Όπως αναμενόταν, το μέγεθος του προβλήματος και το πλήθος των διαθέσιμων γραφικών υποσυστημάτων επηρεάζουν την απόδοση του αλγορίθμου. Για περιπτώσεις πυκνής διακριτοποίησης παρατηρείται επιτάχυνση της διαδικασίας επίλυσης κατά 50% χρησιμοποιώντας το σύνολο των διαθέσιμων GPU πυρήνων.

4 Παραδοτέα

- 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.
- 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)
- 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, και στη συνέχεια, σε βελτιωμένη έκδοση, δημοσιεύθηκαν στο Journal of Physics: Conference Series 490 012097, 2014.
- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB, Fortran, CUDA.
- Η παρούσα τεχνική έκθεση.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη και καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ως σκοπό την ολοκλήρωση του συνολικού στόχου του προγράμματος, προγραμματίζονται ως μελλοντικές δράσεις της ομάδας τα παρακάτω:

- Επέκταση της dDHC σε μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 1$ διαστάσεις
- Επέκταση της dDHC σε μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 2$ διαστάσεις τύπου stripes
- Μελέτη dDHC σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 2$ διαστάσεις με γενικότερη γεωμετρία

Αναφορές

- [1] Akrivis G *Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations*, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012
- [2] R. Alexander "Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE's", *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.
- [3] C. de Boor and B. Swartz "Collocation at Gaussian points", *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.
- [4] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas", *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology* , vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.
- [5] J.C. Butcher "Implicit Runge-Kutta processes", *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.
- [6] J.C.Butcher "The numerical analysis of ordinary differential equations ,", *John Wiley* , 1987.



- [7] Cherniha R and Dutka V *Exact and Numerical Solutions of the Generalized Fisher Equation*, Reports on Mathematical Physics, **47**, 393-412, 2001
- [8] M. Crouzeix "Sur l'approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par des methodes de Runge Kutta", *PhD Thesis*, University Paris VI, Paris, 1975.
- [9] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The modeling of diffusive tumours," *Journal of Biological Systems* , vol.3, pp.937-945, 1995.
- [10] de Boor C and Swartz B *Collocation at Gaussian points*, SIAM Num. Anal., vol. 10, pp. 582-606, 1973
- [11] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006
- [12] Fisher RA *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugen., **7**, 255-369, 1937
- [13] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001
- [14] Gottlieb S and Shu CW *Total variation diminishing Runge-Kutta schemes*, Mat. Comp., **67**, 73-85, 1998
- [15] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS *Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem*, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., **1(6)**, 1-25, 1937
- [16] Hairer E *Unconditionally stable explicit methods for parabolic equations*, Numer. Math., **35**, 57-68, 1980
- [17] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989
- [18] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [19] Murray JD *Mathematical Biology*, Springer, Berlin, 1989
- [20] M.G. Papadomanolaki and Y.G. Saridakis "Hermite-Collocation for one dimensional tumour invasion model with heterogeneous diffusion," *HERMIS-μπ*, vol. 11, pp.63-68, 2010.

- [21] M.G. Papadomanolaki and Y.G. Saridakis "Collocation with discontinuous Hermite elements for a tumour invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions," *in Proceedings of Numan2010 conference "Conference in Numerical Analysis"*, pp. 238-245, 2010.
- [22] M.G. Papadomanolaki "The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations", *PhD Thesis*, Technical University of Crete, 2012 (in Greek)
- [23] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010
- [24] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002
- [25] Schmitt B *Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations*, BIT, **28**, 884-897, 1988
- [26] Shu CW *Total-variation-diminishing time discretizations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **9**, 1073-1084, 1988
- [27] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988
- [28] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition)," *Oxford University Press*, 1985.
- [29] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [30] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.
- [31] K.R.Swanson,C.Bridge,J.D.Murray and E.C.Alvord Jr " Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.
- [32] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.

- [33] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr.“A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection,” *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.
- [34] H. der Vorst, Bi-CGSTAB, *A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci.Stat.Comp., 13: 631-644, 1992.
- [35] R. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, New York: Springer Verlag, 2000.
- [36] Chandra Rohit, *Parallel programming with OpenMP*, M.K., 2001.
- [37] <http://www.nvidia.com/object/tesla-servers.html>.
- [38] <http://www.pgroup.com>.
- [39] <http://www.netlib.org>.
- [40] <http://www.openmp.org>.
- [41] <http://www.openacc.org>.
- [42] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, SIAM, 2003.
- [43] J. Dongarra and I. Duff and D. Sorensen and H. van der Vorst, *Numerical Linear Algebra for high-performance computers*, SIAM, 1998.
- [44] C.E. Houstis, E.N. Houstis, and J. Rice, *Pde computations: Methods and performance evaluation*, Par. Comp., 5: 141-163, 1997.
- [45] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Iterative solution of elliptic collocation systems on a cognitive parallel computer*, Computers and Maths with Appl., 48: 951-970, 2004.
- [46] E.N. Marhioudakis, E. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Mapping parallel iterative algorithms for pde computations on a distributed memory computers*, Parallel Algorithms and Applications, 8: 141-154, 1996.
- [47] E.N. Marhioudakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Bi-CGSTAB for collocation equations on distributed memory parallel computers*, Numerical Mathematics and advanced applications - ENUMATH 2001, Springer, 957-966, 2003.
- [48] E. Mathioudakis and E. Papadopoulou, *Grid computing for the bi-cgstab applied to the solution of the modified helmholtz equation*, Int. J. App. Maths and comp. sciences, (4) 3: 179-184, 2007.

- [49] T. Papatheodorou, *Block aor iteration for nonsymmetric matrices*, Math. Comp., (41) 164: 511-525, 1983.
- [50] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Preconditioning for solving hermite collocation by the bi-cgstab*, WSEAS Trans. on Mathematics, (5) 7: 811-816, 2006.
- [51] C.C.Christara, *Parallel solvers for spline collocation equations*, Advances in Engineering Software, 27: 71-89, 1996.
- [52] S.H.Brill and G.F.Pinder, *Parallel implementation of the bi-cgstab method with block red-black gauss-seidel preconditioner applied to the hermite collocation discretization of partial differential equations*, Parallel Computing, 28: 399-414, 2002.
- [53] E. Mathioudakis, N. Vilanakis, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs*, Proc. of the World Congress on Engineering 2013 (WCE2013, Imperial College - London, U.K.), Best Paper Award of The 2013 International Conference of Parallel and Distributed Computing, 2: 1281-1286, 2013.