

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 2.2

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές



Περιεχόμενα

1	Σκοπός	3
2	Μεθοδολογία	3
2.1	Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων	3
3	Παραδοτέα	6
4	Συνεργασίες	6
5	Μελλοντικές Δράσεις	7
6	Βιβλιογραφία	7



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



1 Σκοπός

Το παρόν έργο θα ασχοληθεί με τη προσομοίωση πολύπλοκων φαινομένων που περιγράφονται από σύνθετα προβλήματα μερικών διαφορικών εξισώσεων με πολλαπλά χωρία και πολλαπλά μοντέλα φυσικής (multidomain multiphysics problems - MDMP) και με την επίλυσή τους σε περιβάλλοντα με σύγχρονες αρχιτεκτονικές. Η Δράση 2.2 (Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ) ξεκινά την υλοποίησή της με μια επισκόπηση των μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση τέτοιων προβλημάτων. Μελετώντας τη σχέση ανάμεσα στα χαρακτηριστικά των προβλημάτων και στις μεθοδολογίες που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση τους, θα μπορέσουμε να επιλέξουμε τις πλέον κατάλληλες μεθόδους για τις εφαρμογές του MATENVMED, τα προβλήματα από την Ιατρική και την Περιβαλλοντική Μηχανική.

Το υπόλοιπο της παρούσης Ετήσιας Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε.

2 Μεθοδολογία

2.1 Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων

Η προσομοίωση φαινομένων που περιγράφονται με πολλαπλά φυσικά μοντέλα σε πολλαπλά χωρία, είναι μια ερευνητική περιοχή η οποία ελκύει το ενδιαφέρον των επιστημόνων από πολλές και διαφορετικές περιοχές τόσο στο παρελθόν [1] αλλά και σήμερα [2]. Η υπολογιστική ισχύς αυξάνεται και προσφέρεται σε όλα τα επίπεδα του υλικού του υπολογιστή, από πολυ-επεξεργαστές υψηλών επιδόσεων (high speed multi-processors) και συστοιχίες υπολογιστών (clusters) έως πολυπύρηνες κάρτες γραφικών (multi-core GPUs). Το γεγονός αυτό κάνει δυνατή την ακριβή προσομοίωση πραγματικών φαινομένων σε αποδεκτούς χρόνους εκτέλεσης, Επίσης η πληθώρα υπολογιστικών περιβαλλόντων [3]–[8] επιτρέπει την καλύτερη δυνατή αξιοποίηση των διαθέσιμων δυνατοτήτων του υλικού (hardware) και του λογισμικού (software). Αυτό μας φέρνει ένα βήμα πιο κοντά στην προσομοίωση προβλημάτων του πραγματικού κόσμου με αποτελεσματικότητα και ακρίβεια.

Ένα πρόβλημα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων είναι πρόβλημα που αποτελείται από πολλαπλά επιμέρους προβλήματα, τα οποία συνήθως διέπονται από διαφορετικούς νόμους και αρχές. Για παράδειγμα νόμους



διατήρησης ή καταστατικούς νόμους και αρχές ισορροπίας ή εξέλιξης. Οι συνιστώσες ενός τέτοιου προβλήματος πολλαπλών φυσικών/χωρίων, συχνά ονομάζονται υποπροβλήματα ή επιμέρους προβλήματα του αρχικού-συνολικού προβλήματος, και συνδέονται μεταξύ τους μέσα από συστήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ) σε κοινά ή/και επικαλυπτόμενα χωρία ή μέσω συνοριακών συνθηκών πάνω στις διεπαφές (κοινά σύνορα) μεταξύ των γειτονικών επιμέρους χωρίων/πεδίων.

Στην πρώτη κατηγορία θα μπορούσαμε να εντοπίσουμε προβλήματα που αφορούν την ηλεκτρική ενέργεια και το μαγνητισμό με υδροδυναμική, ενώ η δεύτερη κατηγορία περιλαμβάνει multiphysics προβλήματα όπως fluid-structure dynamics (aeroelasticity) ή δυναμική των ωκεανών-ατμόσφαιρας (γεωφυσική) [2] κλπ.

Όλα τα προβλήματα πολλαπλών φυσικών και χωρίων ορίζονται μέσα από αλγεβρικές μορφές, πριν διακριτοποιηθούν για να επιλυθούν με οποιαδήποτε κατάλληλη μέθοδο. Οι δύο πιο συνήθεις [2] αλγεβρικές μορφές είναι: (i) το συζευγμένο πρόβλημα ισορροπίας (coupled equilibrium problem - (1))

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

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

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

Θέτοντας $J = \frac{\partial(F_1, F_2)}{\partial(u_1, u_2)}$ και $u = (u_1, u_2)^T$, οι αλγόριθμοι αντιμετώπισης προβλημάτων ισορροπίας (1) μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε 3 ομάδες όπως αυτές καταγράφονται στον Πίνακα 1. Συγκεκριμένα υπάρχουν οι μεθοδολογίες Jacobi, Gauss-Seidel και Newton. Υποθέτοντας ότι το αρχικό πρόβλημα αποτελείται από δύο επιμέρους προβλήματα τότε οι αλγόριθμοι σημειώνονται ως εξής:

Jacobi	Gauss-Seidel	Newton
Ορισμός αρχικής τιμής (u_1^0, u_2^0)		
Για $k=1,2,\dots$ (έως ότου παρατηρηθεί σύγκλιση)		
Υπολόγισε τις (u_1^{k+1}, u_2^{k+1})	Υπολόγισε τις (u_1^{k+1}, u_2^{k+1})	Υπολόγισε το δu
$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$	$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$	$J(u^k)\delta u = -F(u^k)$
$F_2(u_1^k, u_2^{k+1}) = 0$	$F_2(u_1^{k+1}, u_2^{k+1}) = 0$	Υπολόγισε $u^{k+1} = u^k + \delta u$
Τέλος βήματος επαναληπτικής διαδικασίας		

Πίνακας 1: Κατηγορίες αλγορίθμων για προβλήματα ισορροπίας.

Παρατηρούμε ότι στην αριστερή κλάση των αλγορίθμων η εκτέλεση ακολουθεί την μεθοδολογία Jacobi για την επίλυση συστήματος γραμμικών εξισώσεων.



Για παράδειγμα στην k επανάληψη, η νέα λύση στο πρώτο χωρίο u_1^{k+1} υπολογίζεται με βάση την προηγούμενη λύση από το γειτονικό χωρίο u_2^k , ενώ η νέα λύση στο δεύτερο χωρίο u_2^{k+1} υπολογίζεται με βάση την προηγούμενη λύση από το πρώτο χωρίο u_1^k . Η διαδικασία αυτή μπορεί να επεκταθεί για περισσότερα από δύο υποχωρία, όπου κάθε φορά η νέα λύση u_i^{k+1} στο i χωρίο υπολογίζεται χρησιμοποιώντας πληροφορία από τη λύση όλων των γειτονικών χωρίων στην προηγούμενη επανάληψη k . Το συγκεκριμένο σχήμα είναι πλήρως παραλληλίσμο, αφού χρησιμοποιώντας τις λύσεις των επιμέρους προβλημάτων από την προηγούμενη επανάληψη, μπορούμε να υπολογίσουμε τις νέες λύσεις σε όλα τα χωρία ταυτόχρονα.

Οι μέθοδοι τύπου Gauss-Seidel, ακολουθούν το πρότυπο της αντίστοιχης μεθόδου για την επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων. Υποθέτοντας ότι έχουμε n επιμέρους συζευγμένα προβλήματα, η νέα λύση u_i^{k+1} στο i χωρίο υπολογίζεται λαμβάνοντας υπόψιν όλες τις $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}, \dots, u_{i-1}^{k+1}$ από την τρέχουσα επανάληψη και τις u_{i+1}^k, \dots, u_n^k από την προηγούμενη επανάληψη. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία δεν έχει χαρακτηριστικά παραλληλισμού, ωστόσο λόγω της άμεσης χρήσης των διορθωμένων τιμών των γειτόνων συγκλίνει ταχύτερα της Jacobi.

Τέλος, οι αλγόριθμοι τύπου Newton, θεωρούνται αυστηρά συζευγμένα σχήματα καθώς εμπλέκουν τις $\frac{\partial F_i}{\partial u_j}$ στον Ιακωβιανό πίνακα του συστήματος και χρησιμοποιούνται τόσο σε προβλήματα ισορροπίας όσο και σε προβλήματα εξέλιξης.

Ορισμός αρχικής συνθήκης ($u_1(t_0), u_2(t_0)$)
Για $n = 1, \dots, N_t$
Προχωρούμε ένα βήμα στο χρόνο για την u_1 λύνοντας την $\partial_t u_1 = f_1(u_1, u_2(t_{n-1}))$ στο n χρονικό σημείο (δηλ., $u_1(t_n)$)
Προχωρούμε ένα βήμα στο χρόνο για την u_2 λύνοντας την $\partial_t u_2 = f_2(u_1(t_n), u_2)$ στο n χρονικό σημείο (δηλ., $u_2(t_n)$)
Τέλος βήματος επαναληπτικής διαδικασίας

Πίνακας 2: Αλγόριθμοι για προβλήματα εξέλιξης.

Για τα προβλήματα εξέλιξης σε πολλαπλά χωρία και φυσικά μοντέλα, θεωρούμε σχήματα όπως αυτό του Πίνακα 2. Η μεθοδολογία αυτή είναι η απλούστερη δυνατή για την επίλυση παραβολικών προβλημάτων πολλαπλών χωρίων και πολλαπλών φυσικών μοντέλων. Κάθε επιμέρους πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπιστεί με άμεσα ή έμμεσα σχήματα για τη διακριτοποίηση ως προς το χρόνο. Σε κάθε βήμα στο χρόνο χρησιμοποιούμε εμφωλευμένη επαναληπτική διαδικασία για βελτίωση της λύσης στο steady πρόβλημα της συγκεκριμένης χρονικής στιγμής.

Οι μέθοδοι διαχωρισμού του χωρίου [9]–[15] είναι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν αρχικά για να αντιμετωπίσουν τέτοιου είδους προβλήματα. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι ότι διακριτοποιείται το αρχικό σύνθετο πρόβλημα (ακόμη



και αν είναι ήδη χωρισμένο από τη φυσική του) και στη συνέχεια κόβεται σε επιμέρους προβλήματα σε επίπεδο γραμμικής άλγεβρας. Πλήθος μεθόδων, κυρίως επαναληπτικές χρησιμοποιούνται για να επιλύσουν τα επιμέρους γραμμικά συστήματα που προκύπτουν τα οποία είναι ισχυρά συζευγμένα.

Οι Μέθοδοι Χαλάρωσης στη Διεπαφή (ΜΧΔ) [16] αποτελούν μια εναλλακτική μεθοδολογία για την αντιμετώπιση σύνθετων προβλημάτων. Ακολουθούν τη φυσική του προβλήματος προκειμένου να χωρίσουν το σύνθετο πρόβλημα σε επιμέρους προβλήματα απλούστερης γεωμετρίας και φυσικών μοντέλων. Τα υποπροβλήματα αυτά είναι συζευγμένα με κατάλληλες συνθήκες (που επιβάλλει το αρχικό πρόβλημα) πάνω στα κοινά σύνορα των υποχωρίων τους, που ονομάζονται διεπαφές. Παραδείγματα τέτοιων συνθηκών είναι η συνέχεια ή/και η ομαλότητα της λύσης του αρχικού προβλήματος.

3 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της Δράσης 2.2, για το 2012, σύμφωνα με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

Ετήσια Τεχνική Έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

4 Συνεργασίες

Στα πλαίσια της Δράσης 2.2, συνεργάστηκαν μέλη από όλες τις ερευνητικές ομάδες με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας).

Η συνεργασία είχε σκοπό την κατανόηση των ιδιοτήτων των προβλημάτων πολλαπλών χωρίων και πολλαπλών φυσικών μοντέλων (MDMP). Μελέτη προβλημάτων από την Ιατρική και τη περιβαλλοντική μηχανική προκειμένου να βρεθούν κατάλληλες μαθηματικές μέθοδοι για προσομοίωσής τους.

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Μελέτη ιδιοτήτων προβλημάτων MDMP	X	X	X
Μελέτη προβλημάτων Ιατρικής	X	X	
Μελέτη προβλημάτων Περιβαλλοντικής Φυσικής	X	X	

Πίνακας 3: Συνεργασίες των τριών ερευνητικών ομάδων στα πλαίσια της Δράσης 2.2.



5 Μελλοντικές Δράσεις

Κατά τη διάρκεια του 2012 πραγματοποιήσαμε μια επισκόπηση των μεθοδολογιών προσομοίωσης MDMP προβλημάτων. Επίσης μελετήσαμε τα χαρακτηριστικά των εφαρμογών του έργου προκειμένου να βρεθούν κατάλληλες μέθοδοι για την αντιμετώπιση τους. Ξεκινήσαμε να μελετάμε τις ΜΧΔ και σε αυτές θα επικεντρωθούμε στη Δράση 2.2 στα επόμενα βήματα για να αντιμετωπίσουμε απλά προβλήματα MDMP αλλά και πιο πολύπλοκα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου. Συγκεκριμένα, θα μελετήσουμε περαιτέρω μεθοδολογίες για τη λύση ελλειπτικών και παραβολικών κατάλληλες για τα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής.

6 Βιβλιογραφία

References

- [1] M. Mu and J. R. Rice, "Modeling with collaborating pde solvers: Theory and practice," *Contemporary Mathematics*, vol. 180, pp. 427–427, 1994.
- [2] D. E. Keyes, L. C. McInnes, C. Woodward, W. D. Gropp, E. Myra, and M. Pernice, "Multiphysics simulations: Challenges and opportunities," Oct. 2012. [Online]. Available: <http://hpc.sagepub.com/content/27/1/4.full.pdf+html>.
- [3] T. T. Drashansky, "An agent-based approach to building multidisciplinary problem solving environments," PhD thesis, Citeseer, 1996.
- [4] J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, "Sciagents tool: User's guide," 1998.
- [5] L. Boeloeni, D. C. Marinescu, J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, "Agent based scientific simulation and modeling," *Concurrency - Practice and Experience*, vol. 12, no. 9, pp. 845–861, 2000.
- [6] S. Markus, E. N. Houstis, A. C. Catlin, J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, E. Vavalis, D. Gottfried, K. Su, and G. Balakrishnan, "An agent-based netcentric framework for multidisciplinary problem solving environments (mpse)," *International Journal of Computational Engineering Science*, vol. 1, no. 01, pp. 33–60, 2000.



- [7] E. Houstis, A. Catlin, P. Tsompanopoulou, D. Gottfried, G. Balakrishnan, K. Su, and J. Rice, "Gasturbnlab: A multidisciplinary problem solving environment for gas turbine engine design on a network of nonhomogeneous machines," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 149, no. 1, pp. 83–100, 2002.
- [8] J. Michopoulos, P. Tsompanopoulou, E. Houstis, C. Farhat, M. Lesoinne, J. Rice, and A. Joshi, "On a data-driven environment for multiphysics applications," *Future Generation Computer Systems*, vol. 21, no. 6, pp. 953–968, 2005.
- [9] D. E. Keyes and W. D. Gropp, "A comparison of domain decomposition techniques for elliptic partial differential equations and their parallel implementation," *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, vol. 8, no. 2, s166–s202, 1987.
- [10] P. Le Tallec, Y. H. De Roeck, and M. Vidrascu, "Domain decomposition methods for large linearly elliptic three-dimensional problems," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 34, no. 1, pp. 93–117, 1991.
- [11] P.-L. Lions, "On the schwarz alternating method. iii: A variant for nonoverlapping subdomains," in *Third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, SIAM Philadelphia, PA, vol. 6, 1990, pp. 202–223.
- [12] T. F. Chan and T. P. Mathew, "Domain decomposition algorithms," *Acta numerica*, vol. 3, pp. 61–143, 1994.
- [13] R. Natarajan, "Domain decomposition using spectral expansions of steklov-poincaré operators," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 16, no. 2, pp. 470–495, 1995.
- [14] J. R. Rice, E. Vavalis, and D. Yang, "Convergence analysis of a non-overlapping domain decomposition method for elliptic pdes," 1993.
- [15] W. Heinrichs, "Domain decomposition for fourth-order problems," *SIAM journal on numerical analysis*, vol. 30, no. 2, pp. 435–453, 1993.
- [16] J. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, "Interface relaxation methods for elliptic differential equations," *Applied Numerical Mathematics*, vol. 32, no. 2, pp. 219–245, 2000.