

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014



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	Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα	3
2.2	Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ	6
3	Αποτελέσματα	7
3.1	Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για σύνθετα προβλήματα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων	7
3.2	Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ	10
4	Παραδοτέα	11
5	Συνεργασίες	12
6	Μελλοντικές Δράσεις	12
7	Βιβλιογραφία	13

1 Σκοπός

Η Δράση 2.2 (Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ) για το 2014 κύριους στόχους της έχει : (i) σειριακή υλοποίηση ΜΧΔ στο περιβάλλον του FEniCS , (ii) έλεγχο αλγορίθμων ΜΧΔ σε ελλειπτικά προβλήματα, (iii) επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε ελλειπτικά προβλήματα μέσα από πειραματικά δεδομένα, (iv) επαλήθευση παραλληλισμότητας ΜΧΔ με παράλληλη υλοποίηση μέσα στο FEniCS, (v) έλεγχο αλγορίθμων ΜΧΔ σε παραβολικά προβλήματα.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα αποτελέσματα.

2 Μεθοδολογία

2.1 Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα

Οι ΜΧΔ μελετούν σύνθετα προβλήματα ΜΔΕ πολλαπλών μοντέλων φυσικής και πολλαπλών χωρίων με κύριο χαρακτηριστικό τα επιμέρους προβλήματα να ορίζονται σε ένα απλό χωρίο στο οποίο εφαρμόζεται μια ΜΔΕ. Επίσης, μελετούν το σύνθετο πρόβλημα, ερμηνεύοντας τη φυσική του προκειμένου να κατανοήσουμε και να αξιοποιήσουμε όλες τις ιδιότητές του. Το επιμέρους προβλήματα που προκύπτουν, προέρχονται από τεμαχισμό είτε με βάση τη φυσική του αρχικού προβλήματος είτε με βάση θέματα παραλληλισμού. Αυτά τα μικρά προβλήματα μελετώνται ανεξάρτητα και επιλύονται με τις κατάλληλες μεθόδους (FEM, FD, κλπ.). Ωστόσο, υπάρχει σύζευξη μεταξύ των υποπροβλημάτων [1]–[3] στα κοινά σύνορα, που ονομάζονται διεπαφές (interfaces), έτσι ώστε να ικανοποιούνται συνθήκες και ιδιότητες του αρχικού προβλήματος (π.χ., συνέχεια και ομαλότητα της λύσης του αρχικού σύνθετου προβλήματος, ή ασυνέχεια στην παράγωγο της λύσης στο αρχικό πρόβλημα κλπ.).

Αρχικές συνθήκες ορίζονται πάνω στις διεπαφές και μεταφέρονται κατάλληλα ως συνοριακές συνθήκες στα επιμέρους προβλήματα. Αυτά επιλύονται ταυτόχρονα και οι προσεγγίσεις που προκύπτουν συνδυάζονται κατάλληλα μέσω κάποιας ΜΧΔ χρησιμοποιώντας την τιμή της λύσης ή/και της παραγώγου της, πάνω στις διεπαφές για να παραχθούν καλύτερες προσεγγίσεις (πάνω στις διεπαφές). Κατά την ανάλυση των ΜΧΔ, μελετώνται θέματα μαθηματικής ανάλυσης, υπολογιστικής πολυπλοκότητας και θέματα υλοποίησης που έχουν να κάνουν με λογισμικό ή/και υλικό [4]. Η μαθηματική ανάλυση επιτυγχάνεται κυρίως σε απλά μοντέλα φυσικής καθώς δεν είναι εφικτό να αναλυθούν σε βάθος πραγ-



ματικά προβλήματα. Η χρήση υπάρχοντος λογισμικού είναι μεγάλης σημασίας στην υλοποίηση των ΜΧΔ. Υπάρχει πληθώρα πακέτων λογισμικού που υλοποιούν μεθόδους επίλυσης απλών προβλημάτων αλλά πρέπει να συνδυαστούν και υποστηριχθούν κατάλληλα σε επίπεδο λογισμικού αλλά και υλικού, για να επιλύσουμε σύνθετα προβλήματα

Η διαδικασία των ΜΧΔ είναι επαναληπτική [2] και περιγράφεται ως:

1. Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν συνοριακές συνθήκες.
2. Επίλυση του κάθε απλού προβλήματος ΜΔΕ, ταυτόχρονα σε όλα τα υποχωρία με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες.
3. Σύγκριση των νέων τιμών (με τις προηγούμενες) πάνω στις διεπαφές. Υπολογισμός νέων βελτιωμένων τιμών χρησιμοποιώντας κατάλληλη ΜΧΔ.
4. Επιστροφή στο Βήμα 2, μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

Η διαδικασία χαλάρωση στη διεπαφή ποικίλει από απλό μέσο όρο τιμών της συνάρτησης από τα δυο υποχωρία που έχουν κοινό σύνορο τη διεπαφή, μέχρι την εφαρμογή πολύπλοκων τελεστών υψηλής τάξης ακρίβειας με κύριο σκοπό η λύση στο σύνθετο πρόβλημα να ικανοποιεί όλες τις απαραίτητες συνθήκες. Το παραπάνω επαναληπτικό σχήμα, ορίζεται σε επίπεδο φυσικής των προβλημάτων, επομένως η ανάλυση των μεθόδων απαιτεί γνώσεις μαθηματικής ανάλυσης και όχι αριθμητικής ανάλυσης [1], [3]. Τα κύρια πλεονεκτήματα της μεθόδου συνοψίζονται στα εξής: i) παρέχει την ακριβή σύζευξη των διαφόρων μοντέλων τόσο για τις ΜΔΕ όσο και για τις διεπαφές, ii) υποστηρίζει την επαναχρησιμοποίηση του λογισμικού που επιλύουν απλά μοντέλα φυσικής, iii) εισαγάγει ένα υψηλότερο επίπεδο παραλληλισμού στους υπολογισμούς, iv) ακολουθεί τη γεωμετρική και φυσική μοντελοποίηση ενός σύνθετου προβλήματος ΜΔΕ.

Ακολουθεί η μεθοδολογία της χαλάρωσης στη διεπαφή, για προβλήματα που προσομοιώνονται από δεύτερης τάξης ελλειπτικές ΜΔΕ. Τα επιμέρους προβλήματα ΜΔΕ δηλώνονται ως

$$L_i u_i = f_i \quad \text{στο} \quad \Omega_i \quad \text{για} \quad i = 1, \dots, p, \quad (1)$$

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

$$G_{i,j} \left(u_i, \frac{\partial u_i}{\partial \eta_{i,j}}; u_j, \frac{\partial u_j}{\partial \eta_{j,i}}; J_1, J_2 \right) = 0 \quad \text{στο} \quad \Gamma_{i,j} \equiv \Omega_i \cap \Omega_j, \quad (2)$$

όπου $\eta_{i,j}$ το διάνυσμα με κατεύθυνση κάθετη στην διεπαφή $\Gamma_{i,j}$ και J_1, J_2 οι ποσότητες που δηλώνουν τις ασυνέχειες μέσω πηδήματος στην u ή/και την παράγωγο



της. Το $G_{i,j}$ δηλώνει τον τελεστή που θα εφαρμοστεί στις u ή/και στις παραγώγους τους πάνω στην διεπαφή. Επίσης, υποθέτουμε την ύπαρξη συνοριακών συνθηκών στα σύνορα των χωρίων (που είναι υποσύνολα των συνόρων του γενικού χωρίου) αλλά και την ύπαρξη λύσης του κάθε επιμέρους προβλήματος ΜΔΕ.

Στις εργασίες [1]–[3], [5] παρουσιάζονται κάποιες ΜΧΔ για ελλειπτικά προβλήματα. Από αυτές τις μεθόδους μελετήσαμε τη GEO και τη ROB. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι η GEO θέτει πάνω στην διεπαφή των χωρίων Ω_i και Ω_j την τύπου Dirichlet συνθήκη :

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

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

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

Τα παραβολικά σύνθετα προβλήματα μπορούν να αντιμετωπισθούν με όμοιες τεχνικές χαλάρωσης στις διεπαφές των επιμέρους χωρίων, ανάλογα με τους όρους της ΜΔΕ (εκτός του όρου με τη παράγωγο ως προς το χρόνο, π.χ., τους όρους που αφορούν σε reaction-diffusion, advection-diffusion ΜΔΕ. Αν η δημιουργία των επιμέρους προβλημάτων έχει βασιστεί πάνω στις ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά του χωρίου της ΜΔΕ (όπως στις ελλειπτικές ΜΔΕ), τότε ένα πιθανό σχήμα χαλάρωσης στη διεπαφή να είναι το ακόλουθο:

1. Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν αρχικές συνθήκες. Αυτές υπολογίζονται με βάση την αρχική συνθήκη του σύνθετου προβλήματος.
2. Για κάθε βήμα στο χρόνο:
 - (α') Ταυτόχρονη επίλυση, για ένα βήμα στο χρόνο, όλων των επιμέρους προβλημάτων εξέλιξης σε όλα τα υποχωρία με συνοριακές συνθήκες ορισμένες από τις αρχικές συνθήκες όπως έχουν ορισθεί στο βήμα 1 και φυσικά με αρχικές συνθήκες αυτές που επιβάλλει το αρχικό πρόβλημα.
 - (β') Συνδυασμός τιμών της λύσης ή/και της παραγώγου των επιμέρους προβλημάτων πάνω στις διεπαφές (όπως και στην περίπτωση των ελλειπτικών προβλημάτων), για να χρησιμοποιηθούν ως νέες συνοριακές τιμές για τη λύση στο επόμενο χρονικό βήμα. Ο συνδυασμός

που εφαρμόζει η ΜΧΔ επιβάλλει τις κατάλληλες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί το αρχικό σύνθετο πρόβλημα (συνέχεια, ομαλότητα, ασυνέχεια με πήδημα στη συνάρτηση/παράγωγο κλπ.).

3. *Εμφωλευμένες επαναλήψεις μπορεί να χρειαστούν ανάλογα με το πρόβλημα ΜΔΕ.*

Αυτό σχήμα αποτελεί πρόταση που χρειάζεται επιπλέον μελέτη και διερεύνηση.

2.2 Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ

Στην παράγραφο 2.1 παρουσιάσαμε τη μεθοδολογία της χαλάρωσης στις διεπαφές. Παρατηρώντας τον γενικό αλγόριθμο είναι αντιληπτό ότι η συγκεκριμένη μεθοδολογία εμπεριέχει την έννοια του παραλληλισμού. Η επίλυση των διαφορετικών εξισώσεων στα επιμέρους χωρία μπορεί να πραγματοποιηθεί ταυτόχρονα ανά επανάληψη, καθώς τα επιμέρους προβλήματα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Όμοια μπορεί να αντιμετωπισθεί και η επίλυση των διεπαφών, αφού σε κάθε διεπαφή μπορούν να υπολογισθούν οι νέες τιμές ανά επανάληψη, παράλληλα και ανεξάρτητα από τις άλλες διεπαφές.

Στο συγκεκριμένο πακέτο εργασίας πραγματοποιήθηκε μελέτη της υλοποίησης της μεθόδου ROB σε κατανεμημένο περιβάλλον. Έτσι κατέστη δυνατή η επίλυση προβλημάτων μεγάλου μεγέθους, με μικρές απαιτήσεις σε υπολογιστικό χρόνο, με την εκμετάλλευση των σύγχρονων παράλληλων αρχιτεκτονικών.

Για την παραλληλοποίηση των μεθόδων βασιστήκαμε στο σχήμα παραλληλοποίησης μέσω ανταλλαγής μηνυμάτων (message passing). Ο τεμαχισμός των εργασιών (partitioning) πραγματοποιήθηκε σε επίπεδο των επιμέρους χωρίων. Στην πρώτη φάση, κάθε διεργασία επιλύει το πρόβλημα του χωρίου που της αντιστοιχεί. Στη συνέχεια, οι διεργασίες που είναι υπεύθυνες για τις επιμέρους διεπαφές επικοινωνούν μεταξύ τους για την ανταλλαγή των τιμών στα σημεία των διεπαφών, ανανεώνουν τις τιμές των σημείων και συνεχίζουν με την επόμενη επανάληψη. Το συγκεκριμένο σχήμα προσφέρει αρκετή ευελιξία σχετικά με τον τεμαχισμό των διεργασιών ενώ παράλληλα διατηρεί και μικρό το κόστος που απαιτείται για επικοινωνία.

Για την υλοποίηση των παράλληλων μεθόδων χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό RabbitMQ μέσα από το περιβάλλον του FEniCS. Εφαρμόσαμε την υλοποίηση σε ένα πρόβλημα-μοντέλο με τρία χωρία (τόσο με ομοιόμορφη όσο και με μη ομοιόμορφη διαμέριση των χωρίων) και έγινε σύγκριση με την παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου GEO.

Ταυτόχρονα, μελετήσαμε την παραλληλοποίηση των ΜΧΔ σε cloud περιβάλλοντα. Συγκεκριμένα, μελετήσαμε τη μέθοδο GEO, και με όμοιο τρόπο μπορεί η μελέτη να επεκταθεί και σε άλλες μεθόδους. Το κύριο χαρακτηριστικό της μεθοδολογίας της χαλάρωσης στις διεπαφές, είναι η δημιουργία μεγάλου πλήθους



εργασιών, με πιθανή ανομοιογένεια στα επιμέρους χαρακτηριστικά όπως για παράδειγμα το μέγεθος του χωρίου και η μέθοδος διακριτοποίησης του, η μέθοδος επίλυσης της διαφορικής εξίσωσης, το πλήθος των διεπαφών ανά επιμέρους πρόβλημα, οι μέθοδοι αντιμετώπισης των διεπαφών κλπ. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, τα επιμέρους αυτά προβλήματα (είτε είναι επίλυση των επιμέρους διαφορικών προβλημάτων είτε είναι επίλυση προβλημάτων διεπαφών) μπορούν να αντιμετωπισθούν ταυτόχρονα ανά επανάληψη. Άρα η μεθοδολογία της χαλάρωσης στις διεπαφές δημιουργεί (μεγάλο) πλήθος ανομοιόμορφων (ή μη) εργασιών που εκτελούνται ταυτόχρονα και επικοινωνούν μεταξύ τους συχνά (ανά επανάληψη) ενώ ο όγκος των δεδομένων της επικοινωνίας (δεδομένα στις διεπαφές) είναι αρκετά μικρότερος (κατά μια τάξη μεγέθους) από των όγκο των δεδομένων που επεξεργάζονται σε κάθε εργασία επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Τέτοιου είδους προβλήματα μπορούν αντιμετωπισθούν με πολύ αποδοτικό τρόπο σε περιβάλλοντα τύπου Cloud.

Πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στην παράγραφο 3.2.

3 Αποτελέσματα

3.1 Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για σύνθετα προβλήματα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων

Το 2013 ορίσαμε το παρακάτω σεν των πειραμάτων, το οποίο και εξακολουθούμε να υποστηρίζουμε για να συγκεντρώσουμε πειραματικά αποτελέσματα που επαληθεύουν τις ιδιότητες των ΜΧΔ (GEO, ROB) Υπενθυμίζουμε ότι χρησιμοποιήσαμε ένα πρόβλημα ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων με 2 διαφορετικά χωρία που εμφανίζονται στο Σχήμα 1.

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

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

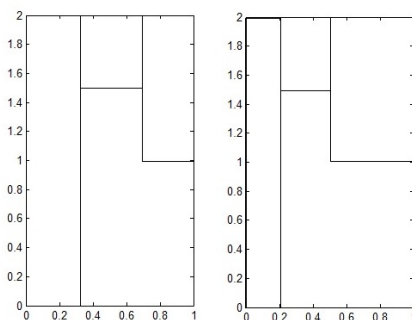
όπου $f(x, y)$ and $u^b(x, y)$ τέτοια ώστε η λύση του προβλήματος να είναι η:

$$u(x, y) = e^{y(x+4)} x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5) \quad (3)$$

Οι διεπαφές για το ομοιόμορφα (ως προς τον άξονα των x) τεμαχισμένο χωρίο βρίσκονται στις ευθείες $x = x_1 = \frac{1}{3}$ και $x = x_2 = \frac{2}{3}$ και για το μη ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο στις $x = x_1 = \frac{1}{5}$ και $x = x_2 = \frac{1}{2}$ ενώ $\gamma^2 = 2$.

Στην πρώτη προσπάθεια χρήσης του FEniCS, υλοποιήθηκαν οι μέθοδοι σειριακά, χωρίς να κάνουμε χρήση του παραλληλισμού της μεθοδολογίας ΧΔ για να επιβεβαιώσουμε τη σύγκλιση στη λύση του αρχικού γενικού προβλήματος.





Σχήμα 1: Ομοιόμορφα (ως προς τον άξονα των x) τεμαχισμένο χωρίο (αριστερά) και Μη Ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο (δεξιά)

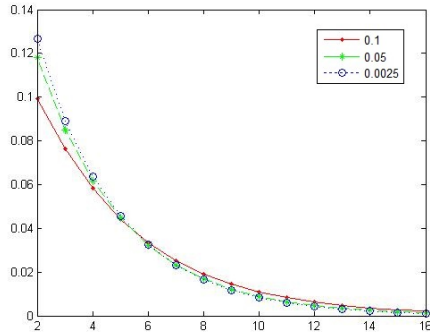
case	h	Ομοιόμορφο πρόβλημα			Μη-Ομοιόμορφο πρόβλημα		
		left	middle	right	left	middle	right
c1	0.1	4x21	4x6	4x11	3x21	4x6	6x11
c2	0.05	8x41	8x11	8x21	5x41	7x11	11x21
c3	0.025	14x81	14x21	14x41	9x81	13x21	21x41
c4	0.0125	28x161	28x41	28x81	17x161	25x41	41x81
c5	0.00625	55x321	55x81	55x161	33x321	49x81	81x161
c6	0.003125	108x641	108x161	108x321	65x641	97x161	161x321
c7	0.0015625	214x1281	214x321	214x641	129x1281	193x321	321x641

Πίνακας 1: Περιπτώσεις που εξετάστηκαν με διαφορετικά βήματα διακριτοποίησης και μεγέθη πλέγματος των χωρίων για τα 3 χωρία των 2 προβλημάτων.

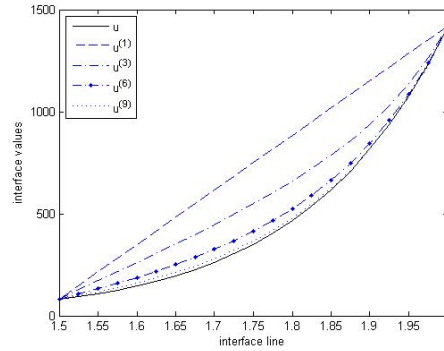
Το επόμενο βήμα στα πειραματικά αποτελέσματα των ΜΧΔ ήταν η επαλήθευση του παραλληλισμού που τις διέτουν, οπότε και υλοποιήθηκαν οι μέθοδοι παράλληλα μέσα στο FEniCS. Διεξήχθησαν πειράματα για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διακριτοποίησης h , η οποία λαμβάνει ίδιες τιμές ως προς την x και την y κατεύθυνση. Τα παραγόμενα πλέγματα καταγράφονται στον Πίνακα 1, ενώ το πλήθος των σημείων στις διεπαφές είναι ίσο με το πλήθος των σημείων στη y κατεύθυνση του πλέγματος του μεσαίου χωρίου, δηλαδή αυξάνει από 6 έως 641 σημεία και στα δύο προβλήματα. Στο ομοιόμορφο πρόβλημα το αριστερό χωρίο είναι κατά πολύ μεγαλύτερο σε σχέση με τα άλλα δυο χωρία. Στο μη ομοιόμορφο πρόβλημα το μεγαλύτερο χωρίο είναι το δεξί με σημαντικά αυξημένο κόστος υπολογισμών. Οι διεπαφές και στα δυο προβλήματα έχουν το ίδιο πλήθος σημείων και κατά συνέπεια ίδιο φόρτο εργασίας.

Ο τρόπος σύγκλισης αποτυπώνεται στη Σχήμα 2. Στο Σχήμα 2α' εμφανίζεται η νόρμα μεγίστου των σχετικών διαφορών των διαδοχικών προσεγγίσεων της λύσης ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων στη διεπαφή $x = x_1 = \frac{1}{3}$ για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για $h = 0.1, 0.05, 0.025$. Επιβεβαιώνεται ότι οι μέθοδοι ΧΔ είναι ανεξάρτητες από την παράμετρο διακριτοποίησης h . Παραμένοντας στο ίδιο πρόβλημα και την ίδια διεπαφή, εμφανίζουμε την ακριβή λύση και τις προσεγγιστικές λύσεις του προβλήματος για τις επαναλήψεις 1, 3, 6, 10 με

$h = 0.05$. Παρόμοια αποτελέσματα λαμβάνουμε και για την άλλη διεπαφή του ομοιόμορφου προβλήματος αλλά και για τις δυο διεπαφές του μη-ομοιόμορφου προβλήματος.



(α')



(β')

Σχήμα 2: Σύγκλιση της μεθόδου GEO για το ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο. Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων (2α') και ακριβής και προσεγγιστική λύση στη διεπαφή (2β').

Στα πλαίσια εφαρμογής των ΜΧΔ σε προβλήματα εξέλιξης, θεωρήσαμε ένα μονοδιάστατο παραβολικό πρόβλημα πολλαπλών χωρίων το οποίο αποτελεί απλή προσομοίωση της συμπεριφοράς υγείων και καρκινικών κυττάρων στο εγκέφαλο. Το πρόβλημα περιγράφεται στο [6] και συνοψίζεται στη ΜΔΕ:

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x, x \in [a, b], t \geq 0 \\ u_x(\alpha, t) = 0, u_x(b, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (4)$$

όπου

$$D(x) = \begin{cases} \gamma, & a \leq x \leq \omega_1 \\ 1, & \omega_1 \leq x \leq \omega_2 \\ \gamma, & \omega_2 \leq x \leq b \end{cases} \quad (5)$$

και $\gamma = \frac{D_g}{D_w} < 1$ είναι μια σταθερά που περιγράφει τον συντελεστή διάχυσης μεταξύ γκρι και υγείων περιοχών του εγκεφάλου. Επίσης $\alpha = -5, \omega_1 = -1, \omega_2 = 1, b = 5, \gamma = 0, 5$ και

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

Το πρόβλημα έχει αντιμετωπισθεί στο [6] με μη συνεχείς Galerkin Collocation μεθόδους και χρησιμοποιήσαμε αυτή την υλοποίηση για να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα από την υλοποίηση πολλαπλών συνεχών Galerkin μεθόδων με ΜΧΔ. Δεν υπάρχουν δημοσιευμένα αποτελέσματα και τα πειραματικά δεδομένα χρειάζονται περισσότερη μελέτη.

3.2 Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ

Για την υλοποίηση των ΜΧΔ σε κατανεμημένο περιβάλλον χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό RabbitMQ μέσα από το περιβάλλον του FEniCS και η μέθοδος ROB. Για την επαλήθευση της παραλληλισμότητας των αλγορίθμων και στις δυο υλοποιήσεις χρησιμοποιήσαμε το ελλειπτικό πρόβλημα που έχουμε ορίσει στην παράγραφο 3.1.

Από τα πειραματικά αποτελέσματα, παρατηρήσαμε ότι η παράλληλες υλοποιήσεις μειώνουν σημαντικά τον χρόνο εκτέλεσης των προβλημάτων. Συγκεκριμένα ενώ στις σειριακές υλοποιήσεις σε κάθε επανάληψη το υπολογιστικό κόστος είναι το άθροισμα του πλήθους των υπολογισμών του κάθε επιμέρους προβλήματος, στην παράλληλη υλοποίηση το κόστος κάθε επανάληψης ταυτίζεται με το κόστος του μεγαλύτερου υποπροβλήματος. Στην περίπτωση ομοιόμορφων υποπροβλημάτων το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη της μεθόδου είναι ίσο με το κόστος της σειριακής υλοποίησης διαιρεμένο με το πλήθος των υποπροβλημάτων.

Στον πίνακα 2 καταγράφονται οι συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO [7] μέσω της πλατφόρμας του FEniCS. Η σειριακή υλοποίηση έχει εκτελεσθεί σε υπολογιστικό κόμβο με 4 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620, 2.00GHz επεξεργαστές και 2GB RAM και η παράλληλη υλοποίηση σε 3 ίδιες ισχύος κόμβους, στην Cloud υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων του Πανεπιστημίου Πατρών (CEID-UP).

Οι χρόνοι της σειριακής εκτέλεσης αφορούν στους χρόνους υπολογισμών των τριών χωρίων για 16 επαναλήψεις. Οι χρόνοι της παράλληλης υλοποίησης αντιστοιχούν στους χρόνους υπολογισμών του μεγαλύτερου υποχωρίου μαζί με τους υπολογισμούς στις διεπαφές του χωρίου για 16 επαναλήψεις. Καθώς η παράμετρος της διακριτοποίησης μικραίνει, το υπολογιστικό κόστος αυξάνει σημαντικά ενώ το κόστος της επικοινωνίας αυξάνει κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερη. Έτσι η εξοικονόμηση χρόνου είναι εμφανής για λεπτότερες διαμερίσεις.

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7
	Uniform Problem						
Serial	1.900	2.664	5.216	12.883	40.883	178.217	996.348
Parallel	3.495	4.068	6.140	13.595	39.808	154.633	723.731
	Non Uniform Problem						
Serial	2.294	2.854	5.111	13.251	37.266	179.561	1057.644
Parallel	3.720	4.264	5.732	10.633	34.172	126.607	918.838

Πίνακας 2: Συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO.

Από τη υλοποίηση της κατανεμημένης ROB ενδεικτικά πειραματικά αποτελέσματα καταγράφονται στον Πίνακα 3 όπου συγκρίνονται με τους χρόνους της GEO από το περιβάλλον cloud. Οι χρόνοι περιέχουν υπολογισμούς στα υποχωρία, στις διεπαφές αλλά και το κόστος επικοινωνίας για 15 επαναλήψεις.



Προβλήματα	ROB	GEO
C1	16.004	15.495
C2	16.281	16.068
C3	17.392	18.140
C4	23.634	25.595
C5	45.456	51.808
C6	132.179	166.633
C7	899.050	735.731

Πίνακας 3: Συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της παράλληλης υλοποίησης της ROB και GEO.

Παρατηρούμε ότι οι χρόνοι και στις δύο μεθόδους στα δυο διαφορετικά περιβάλλοντα είναι ίδιας τάξης. Αυτό είναι αναμενόμενο, αφού και το κόστος των υπολογισμών και στις 2 μεθόδους ΧΔ είναι γραμμικό ως προς το πλήθος των σημείων της διεπαφής.

Η επιβάρυνση που προκαλεί η επικοινωνία, στην περίπτωση του κατανεμημένου περιβάλλοντος, δεν είναι σημαντική καθώς το μέγεθος των δεδομένων είναι κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερο από το πλήθος των δεδομένων που επεξεργάζονται οι διεργασίες που επιλύουν τις διαφορικές εξισώσεις

Για την πειραματική αξιολόγηση της μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε το μοντέλο-πρόβλημα με τρία χωρία που ορίστηκε στην παράγραφο 3.1. Όπως παρατηρήσαμε, η προτεινόμενη υλοποίηση επιτυγχάνει γραμμική μείωση του χρόνου εκτέλεσης, ανάλογα με τα VMs που χρησιμοποιούνται. Ένα ακόμη πλεονέκτημα της προτεινόμενης υλοποίησης είναι η αποδοτική χρήση των διαθέσιμων πόρων μέσω της εκτέλεσης των VMs με την βέλτιστη υπολογιστική ισχύ και μνήμη για την επίλυση του αντίστοιχου προβλήματος.

4 Παραδοτέα

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

Τεχνική Έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

Επιστημονικά άρθρα Στα πλαίσια της εν λόγω Δράσης παρήχθησαν οι εξής δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια. Ορισμένες από τις δημοσιεύσεις περιέχουν υλικό που καθορίζεται από άλλες δράσεις του έργου και αυτό είναι αποτέλεσμα της συνεργασίας μεταξύ των ερευνητικών ομάδων του έργου :

- Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, P. Tsompanopoulou, 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece. pp 260-265.



	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (distrib)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO με Collocation	X	X	

Πίνακας 4: Συνεργασίες των τριών ερευνητικών ομάδων στα πλαίσια της Δράσης 2.2.

- Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method, A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp 167-173.

Πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων:

- Προσθήκες σε πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.

5 Συνεργασίες

Ο Πίνακας 4 περιγράφει συνοπτικά τη συνεργασία μεταξύ των ομάδων του έργου, στα πλαίσια της Δράσης 2.2 και με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας).

6 Μελλοντικές Δράσεις

Κατά τη διάρκεια του 2014 δύο συγκεκριμένες μέθοδοι (ROB και GEO) χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων μοντέλων. Υπήρξε σοβαρή προσπάθεια για την χρήση ΜΔΧ στα πραγματικά προβλήματα-εφαρμογές από την Ιατρική. Στα επόμενα βήματα είναι η παραπέρα μελέτη των ΜΧΔ, τόσο σε προβλήματα μοντέλα όσο και σε πραγματικά προβλήματα και εφαρμογή τους στα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής.



7 Βιβλιογραφία

References

- [1] J. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, “Fine tuning interface relaxation methods for elliptic differential equations,” *Applied numerical mathematics*, vol. 43, no. 4, pp. 459–481, 2002.
- [2] P. Tsompanopoulou and E. Vavalis, “An experimental study of interface relaxation methods for composite elliptic differential equations,” *Applied Mathematical Modelling*, vol. 32, no. 8, pp. 1620–1641, 2008.
- [3] —, “Analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations,” *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 226, no. 2, pp. 370–387, 2009.
- [4] D. E. Keyes, L. C. McInnes, C. Woodward, W. Gropp, E. Myra, M. Pernice, J. Bell, J. Brown, A. Clo, J. Connors, *et al.*, “Multiphysics simulations: Challenges and opportunities,” *International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 27, no. 1, pp. 4–83, 2013.
- [5] 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.
- [6] J. E. Athanasakis, M. Papadomanolaki, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, “Discontinuous hermite collocation and diagonally implicit rk3 for a brain tumour invasion model,” in *Proceedings of the World Congress on Engineering*, vol. 1, 2013.
- [7] S. L. A. Korfiati P. Tsompanopoulou, “Serial and parallel implementation of an interface relaxation method,” in *6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014)*, 2014.

