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 2.3

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

1.1 Συνοπτική παρουσίαση

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

Τίτλος Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

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

Παραδοτέα:

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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

2 Μεθοδολογία

Στόχος των αρχικών δραστηριοτήτων μας το έτος 2012 ήταν η εξοικείωση των μελών υλοποίησης του έργου με τις βασικές έννοιες που εμπλέκονται στην προτεινόμενη μεθοδολογία.

Αλλά πριν αρχίσουμε τη ουσιαστική συζήτηση για την προσομοίωση μεθοδολογία μας, ας εξετάσουμε μερικά τεχνικά σημεία. Οι τεχνικές που χρησιμοποιούμε για την προσομοίωση Monte Carlo είναι αντίστοιχες αυτών που αναφέρονται στην παραγωγή τυχαίων αριθμών. Ας δούμε ένα απλό παράδειγμα Έστω ότι θέλουμε να δημιουργήσουμε ένα προσομοιωμένο δείγμα με τη μονοδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $f(x) = 1 + x2$ στην περιοχή $[-1.0, +1.0]$. Υπάρχουν διάφοροι τρόποι να το κάνουμε αυτό:

Η μέθοδος βάρους Η διαδικασία στη μέθοδο αυτή είναι μάλλον τετριμμένη. Γεννάμε ομοιόμορφους τυχαίους αριθμούς $x_i = R[-1.0, +1.0]$, και τους επισυνάπτουμε βάρος $w_i = 1 + x_i^2$.

Η μέθοδος της απόρριψης Στην περίπτωση αυτή έχουμε $fmax = 2.0$ στο διάστημά μας. Άρα γεννάμε: $x_i = R[-1., +1.] = 2R[0., 1.]-1.$ και $r_i = R[0., +2.] = 2R[0., 1.]$ Απορρίπτουμε το σημεία αν $r_i > 1+x_i^2$. Να σημειώσουμε εδώ ότι η απόδοση της προσομοίωσης στην περίπτωση αυτή είναι:

$$\epsilon = \frac{\int_{-1}^{1}(1+x^2)dx}{[1-(-1)]f_{max}} = 2/3$$

Με άλλα λόγια το 1/3 των σημείων που γεννάμε απορρίπτεται.

Η μέθοδος του αντιστρόφου μετασχηματισμού Η μέθοδος του αντιστρόφου μετασχηματισμού είναι η αντίστοιχη της σημαντικής δειγματοληψίας στην ολοκλήρωση. Μετασχηματίζουμε την $f(x)$ στην $F(x)$ με $f(x)dx = dF$, οπότε η $F(x)$ δεν είναι απλά η αθροιστική πυκνότητα πιθανότητας:

$$F(x) = \int_{x_{min}} xf(x)dx$$

Με τη μέθοδο του αντίστροφου μετασχηματισμού έχουμε απόδοση 1, φυσικά, αλλά δεν θα πρέπει να μας διαφύγει, ότι για κάθε σημείο απαιτείται ο υπολογισμός δύο κυβικών και μίας τετραγωνικής ρίζας. Αξίζει λοιπόν, να πειραματιστεί κανείς για να δει αν τελικά έχει τελικά κάποιο υπολογιστικό όφελος σε σχέση με τη μέθοδο της απόρριψης.

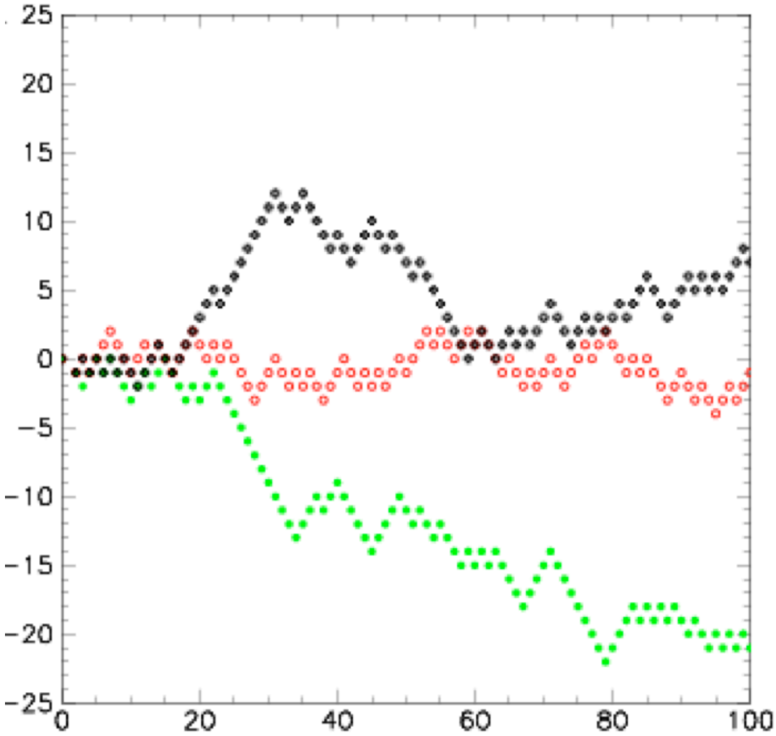
Λόγο του διεπιστημονικού χαρακτήρα της αναφερόμενης δράσης τα μέλη πρέπει να εξοικειωθούν τόσο με γενικότερες μεθοδολογίες όσο και σε θέματα τεχνικής φύσεως. Θα πρέπει να συνεχίσουμε τη συζήτησή μας για την προσομοίωση Monte Carlo με κάποιο καταλληλότερο θέμα από την τυχαία κίνηση, δεδομένου ότι αποτελεί ένα πολύ συχνά εμφανιζόμενο πρόβλημα και ταυτόχρονα προσεγγίζεται, όπως θα δούμε, με απλούστατο τρόπο από την τεχνική Monte Carlo. Υπάρχουν πολλές φυσικές διαδικασίες, όπως η κίνηση Brown, ή η κίνηση των ηλεκτρονίων σε αγωγούς, όπου κάποιο σωματίδιο εμφανίζεται να κινείται τυχαία. Η απλούστερη περίπτωση αφορά ένα κινητό (walker) που κινείται σε μία διάσταση με μοναδιαία βήματα. Ας υποθέσουμε ότι το κινητό μας ξεκινά από τη θέση $x = 0$ και κάνει το κάθε του μοναδιαίο βήμα δεξιά ή αριστερά με ίση πιθανότητα. Τα μόρια σε ένα διάλυμα κάνουν το κάθε τους βήμα σε περίπου ίσα χρονικά διαστήματα. Μπορούμε λοιπόν να παρακολουθήσουμε το κινητό μας στο χρόνο ακολουθώντας τον αριθμό των βημάτων του. Ο υπολογιστικός κώδικας είναι απλούστατος και δίνεται παρακάτω. Στο σχήμα 1 φαίνονται τρία τυχαία παραδείγματα μονοδιάστατης στοχαστικής κίνησης από διαδοχικές κλήσεις του υπολογιστικού κώδικα με διαφορετική αρχική τιμή στο γεννήτορα τυχαίων αριθμών.

Listing 1: Τυχαίοι περίπατοι με μοναδιαίο βήμα σε μία διάσταση

```
SUBROUTINE RANDOM\_WALK1(ISEED)
        IDUMMY=ISEED  ! Initialisation of random sequence
        NSTEP=100     ! number of time steps
        X =0.         ! Initial position
        T =0.         ! at time = 0
        DO ISTEP=2,NSTEP   ! Perform the time steps
            R = RUN0(IDUMMY)-0.5  ! random number in -0.5 - 0.5
            X = X+ABS(R)/R        ! move +1 or -1 according to sign of R
*            X = X+2.*R           ! move uniformly in -1 : +1 range
            T = ISTEP             ! time according to steps
        ENDDO
 99     CONTINUE
        RETURN
        END
```

Μπορούμε εύκολα να συμπεράνουμε τα εξής. Έστω ότι η απόσταση που καλύπτει το κινητό μας μετά από n βήματα. Αφού η πιθανότητα να κινηθεί δεξιά ή αριστερά είναι η ίδια, η μέση τιμή $< x >$ της θέσης πρέπει να είναι μηδέν. Με τον όρο μέση τιμή εδώ, εννοούμε το μέσο όρο σε πολλά τυχαία κινητά τον οποίο υπολογίζουμε παράγοντας πολλές προσομοιώσεις. Μια πιο ενδιαφέρουσα και χρήσιμη ποσότητα είναι η $< x^2 >$. Η μέση τιμή δηλαδή, του τετραγώνου της απόστασης μετά από n βήματα, η οποία καθορίζει και το ποσό της μονοδιάστατης (στην περίπτωση αυτή) διάχυσης. Ας δούμε λίγο λεπτομερέστερα ποια πρόβλεψη έχουμε για τους μέσους όρους στην τυχαία κίνηση. Η θέση xn μετά από n τυχαία βήματα r_i, δίνεται από τη σχέση $x_n = \sum_{i=1} n r_i$. Επίσης έχουμε ότι $x_n^{=} \sum_{i=1} n \sum_{j=1}^{n} r_i r_j$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 1: Μονοδιάστατη περίπτωση τυχαίας κίνησης μοναδιαίου βήματος. Παρουσιάζεται, για τρεις διαφορετικές περιπτώσεις, η θέση του κινητού ως συνάρτηση του χρόνου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Δεδομένου ότι τα βήματα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους, αν πάρουμε τη μέση τιμή ενός μεγάλου αριθμού κινητών, οι όροι για $i \neq j$ θα αλληλοαναιρεθούν και θα μείνουν στο άθροισμα μόνο αυτοί όπου $i = j$.

Για μια σύγχρονη και ενδελεχή θεώρηση του θέματος των τυχαίων περιπάτων ο αναγνώστης παραπέμπεται στο βιβλίο [2] που είναι διαθέσιμο ηλεκτρονικά στον Παγκόσμιο Ιστό `http://www.math.uchicago.edu/~lawler/srwbook.pdf`.

3 Υπάρχον λογισμικό

Επιχειρούμε μια μελέτη για τον εντοπισμό και την αξιολόγηση λογισμικών συστημάτων τα οποία θα μπορέσουν να αποτελέσουν δομικά στοιχεία της υλοποίησης των μεθόδων μας.

Για παράδειγμα η βιβλιοθήκη randomwalk [1] η οποία δημιουργεί τυχαίους περιπάτους με βάση τις τιμές διαφόρων παραμέτρων όπως

Το πλήθος των βημάτων του περιπάτου

Το μήκος των βημάτων, είτε ένα σταθερό μήκος, ή το μήκος λαμβανόμενο ομοιόμορφα στην τύχη από ένα συγκεκριμένο κατάλογο.

Η γωνία του κάθε βήματος, είτε λαμβάνονται ομοιόμορφα τυχαία από μια συγκεκριμένη λίστα, είτε είναι ομοιόμορφα κατανεμημένη μεταξύ του 0 και 360 μοιρών.

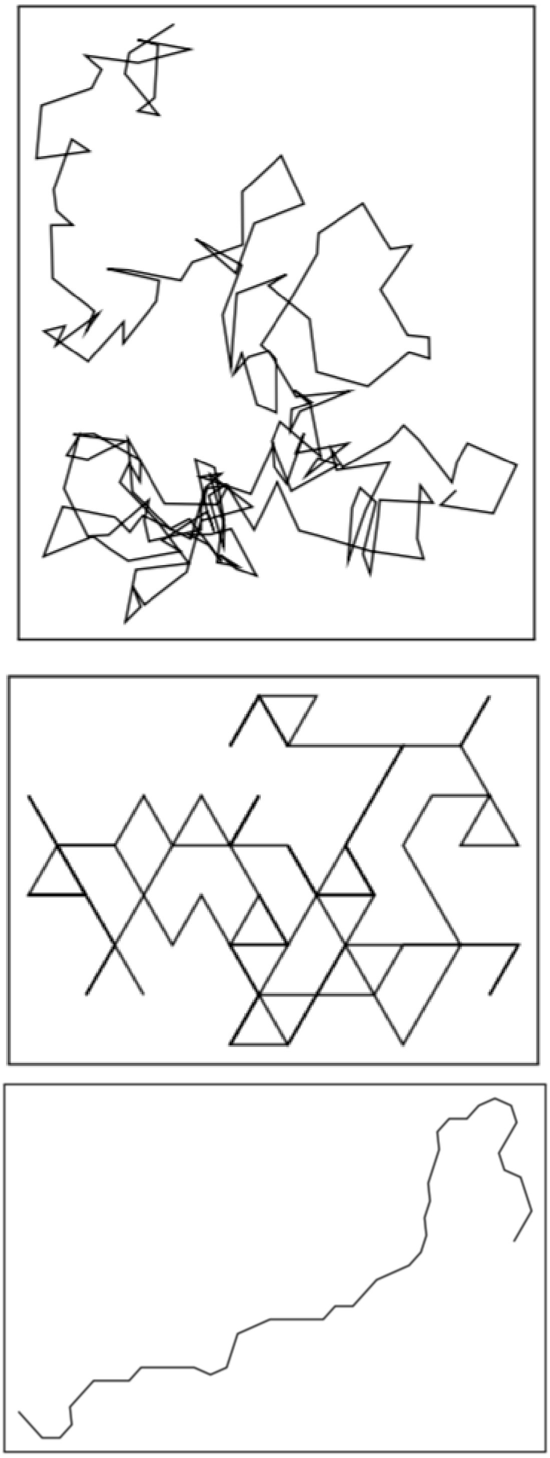
Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι οι παρακάτω εντολές έχουν σαν αποτέλεσμα του αντίστοιχους τυχαίους περιπάτους που δίνονται στο σχήμα 2

- RandomWalk number = 200, length = 4pt, 10pt
- RandomWalk number = 100, angles = 0,60,120,180,240,300, degree
- RandomWalk number = 50, length = 1ex, angles = 0,24,48,-24,-48, degree, angles-relative

4 Παραδοτέα

Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση Το παρόν κείμενο.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Σχήμα 2: Διάφοροι τύποι περιπάτων που κατασκευάστηκαν με την χρήση της RandomWalk.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

5 Συνεργασίες

Στα πλαίσια των ερευνητικών μας δραστηριοτήτων της δράσης 2.3 μέλη της ομάδας εργασίας του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας έχουν ενημερώσει τα υπόλοιπα μέλη της ομάδας του έργου σχετικά με τα βασικά στοιχεία και τις αναμενόμενες δυνατότητες των αναδυόμενων υβριδικών μεθόδων.

6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

Το επόμενο βήμα στην αναφερόμενη ενότητα είναι ο σχεδιασμός και η ανάπτυξη του βασικού υβριδικού αλγορίθμου.

Αναφορές

[1] Bruno Le Floch. *The randomwalk package: customizable random walks using TikZ*. CTAN, 2012.

[2] Gregory F. Lawler and Vlada Limic. *Random Walk: A Modern Introduction*. Cambridge Studies in Advanced Mathematics (No. 123), 2015.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης