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 2.3

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

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 υπο-προβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων διαφορών) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων των υπο-προβλημάτων. 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
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2 Στοχαστικοί/Ντετερμινιστικοί Επιλυτές για προβλήματα ελλειπτικών ΜΔΕ.

Με βάση την μελέτη πεδίου που συνοπτικά παρουσιάσαμε στην Τεχνική Έκθεση του 2013 καταλήξαμε στο παρακάτω αλγοριθμικό σχήμα.

Θεωρούμε το ακόλουθο ελλειπτικό πρόβλημα οριακής τιμής

$$Lu(x) = f(x) \ \ x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d, \tag{1}$$

$$Bu(x) = g(x) \ \ x \in \partial\mathcal{D}, \tag{2}$$

όπου L είναι ένας ελλειπτικός διαφορικός τελεστής, B τελεστής ορίου και $d \in \mathbb{N}$.

Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες κανονικότητας του κλειστού συνόλου $\mathcal{D}$, των τελεστές L και B και των δοθέντων συναρτήσεων $f(x)$ και $g(x)$ ικανοποιούνται. Αυτές οι συνθήκες διασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης $u(x)$ στο $C_2(\mathcal{D} \cap \partial\mathcal{D})$ του προβλήματος (1)–(2). Επιπλέον, υποθέτουμε ότι το πεδίο $\mathcal{D}$ αποτελείται από (ή μπορεί να διαιρεθεί σε) $\mathcal{N}_\mathcal{D}$ υποπεδία, π.χ.

$$\mathcal{D} = \cup_{\mu=1}^{\mathcal{N}_\mathcal{D}} \mathcal{D}_\mu \tag{3}$$

και ότι L_μ και f_μ είναι περιορισμοί των L και f στο $\mathcal{D}_\mu$ ενώ B_μ και g_μ είναι περιορισμοί των B και g στο $\partial\mathcal{D}_\mu \cap \partial\mathcal{D}$.

Ορίζουμε τελικά τη διεπαφή μεταξύ των δύο υποπεδίων $\mathcal{D}_\mu$ και $\mathcal{D}_\nu$ ως

$$\mathcal{I}_{\mu,\nu} = \partial\mathcal{D}_\mu \cap (\partial\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{D}_\nu) \subset \mathbb{R}^{d-1}, \quad \mu, \nu = 1, \ldots, \mathcal{N}_\mathcal{D}. \tag{4}$$

Υποθέτοντας $\mu \neq \nu$,. Προφανώς θεωρούμε μόνο τις διεπαφές για τις οποίες έχουμε ότι $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \neq \emptyset$.

Είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι η ανωτέρω γενική μεθοδολογία που γίνεται ιδιαίτερα ελκυστική σε πολλές μορφές του πραγματικού κόσμου, για παράδειγμα, όταν οι περιορισμοί του ελλειπτικού τελεστή L δεν είναι οι ίδιοι σε όλα τα υποπεδία, όταν υπάρχουν ιδιόμορφα σημεία σε ορισμένους υποτομείς, όταν ο τομέας PDE $Omega$ είναι πολύπλοκος και μπορεί να απλοποιηθεί αν αποσυντεθεί σε υποτομείς Idots. Σε τέτοιες περιπτώσεις, είναι πολύ σημαντικό ότι ένας επιλέγει την πιο πρόσφορη τοπική λύσης προσαρμοσμένη σε κάθε συγκεκριμένο υποπεδίο και τους περιορισμούς των τελεστών και των λειτουργιών σε αυτό. Επιπλέον, ο παραπάνω σχεδιασμός μας προσφέρει τη δυνατότητα να υπολογίσουμε τη λύση μόνο σε επιλεγμένους υποτομείς που έχουν ιδιαίτερη σημασία για εμάς.

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

Data: $i_1, i_2, \ldots, i_N$: τα id των υποπεδίων στα οποία επιθυμούμε να υπολογίσουμε τη λύση.
Result: $\tilde{u}_\mu$, $\mu = i_1, \ldots, i_N$: προσεγγίσεις των περιορισμών της ακριβής λύσης u στο υποπεδίο $\mathcal{D}_\mu$, $\mu = i_1, \ldots, i_N$.

```
// PHASE I: E
;
```

while $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \subset \cup_{j=1}^{N} \partial \mathcal{D}_{i_j}$ **do**

Επιλογή σημείων ελέγχου $x_i \in \mathcal{I}_{\mu,\nu}, \quad i = 1, 2, \ldots, M_{\mu,\nu}$;
Εκτίμηση λύσης u στα σημεία ελέγχου x_i χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo;
Υπολογισμός της παρεμβάλουσας $u^I_{\mu,\nu}$ του $u\mu, \nu$χρησιμοποιώντας τα σημεία ελέγχου x_i;

end

```
// PHASE II: E
;
```

for $j = 1, 2, \ldots, N$ **do**

Λύση του προβλήματος ΜΔΕ:;

$L_{i_j} u_{i_j}(x) = f_{i_j}(x) \quad x \in \mathcal{D}_{i_j}$;
$B_{i_j} u_{i_j}(x) = g_{i_j}(x) \quad x \in \partial\mathcal{D}_{i_j} \cap \partial\mathcal{D}$;
$L_{i_j} u_{i_j}(x) = h_{i_j}(x) \quad x \in \mathcal{D}_{i_j}$; $\quad // \; h_{i_j}(x)$ $\qquad u^I_{\mu,\nu}$s

end

Algorithm 1: The Generic Algorithm.

3 Στοιχεία Υλοποίησης

Η υλοποίησή μας βασίζεται στη μέθοδο περιπάτων σε σφαίρες [2]. Ας πούμε, ότι θέλουμε να εκτιμήσουμε το $u(x_0)$. Εάν s είναι η τρέχουσα εκτίμηση της λύσης, $B(x)$ είναι η μεγαλύτερη σφαίρα του τομέα εστιασμένη στο σημείοx, $q(y)$ είναι η δεξιά πλευρά του προβλήματος, και $a(d)$ είναι μια συνάρτηση που σχετίζεται με τη συνάρτηση του Green για τη λειτουργία του προβλήματος, που παίρνει ως είσοδο την ακτίνα του $B(x)$. Ένας περίπατος απαιτεί τους παρακάτω υπολογισμούς. βήμα i: ανάθεση το x_0 στο x; ανάθεση του 0 στο s; βήμα ii: εάν x είναι αρκετά κοντά στα όρια, πήγαινε στο βήμα v; βήμα iii: επίλεξε τυχαία ένα σημείο y μέσα στο $B(x)$, λαμβάνοντας υπόψη την πυκνότητα του $B(x)$ (περισσότερα σε αυτό στη συνέχεια); ανάθεση στο s, το άθροισμα της προηγούμενης τιμής του s, συν το γινόμενο του $q(y)$ πολλαπλασιαζόμενο με $a(d)$; βήμα iv: επίλεξε τυχαία ένα σημείο στην επιφάνεια του $B(x)$, ανάθεση του σημείου αυτού στο x; πήγαινε στο βήμα ii; βήμα v: επιστροφή s; Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται πολλές φορές, και ο μέσος όρος των εκτιμήσεων στο τέλος κάθε διαδικασίας χρησιμοποιείται ως τελική εκτίμηση.

Υπάρχει μια σημαντική διαφορά στην εφαρμογή μας, όσον αφορά την παρεμβολή μεταξύ των περιπτώσεων των 2-διαστάσεων και των 3-διαστάσεων. Στην περίπτωση των τριών διαστάσεων χρειαζόμαστε παρεμβολή 2-διαστάσεων. Δεδομένου ότι η τελευταία είναι σχετικά περίπλοκη από την άποψη του υπολογισμού κάνουμε precompute των παρεμβολών και τις τροφοδοτούμε στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων. Χρησιμοποιούμε Πολυεπίπεδη B-splines Βιβλιοθήκη Sintef του (MBA[1]). Συγκεκριμένα χρησιμοποιούμε [3]. Εδώ, επίσης, οι υπολογισμοί για κάθε παρεμβάλουσα εκτελούνται παράλληλα.

Στην περίπτωση των δύο διαστάσεων οι υπολογισμοί είναι σχετικά απλοί και έχουμε επιλέξει να μην γίνεται προεπεξεργασία των παρεμβολών. Αντ 'αυτού, έχουμε παράσχει στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων τις πληροφορίες που απαιτούνται για τον υπολογισμό των απαιτούμενων παρεμβολών επί τόπου. Για την παρεμβολή μίας διάστασης χρησιμοποιούμε την C ++ βιβλιοθήκη John Burkardt της spline.

Σαφώς,και στις δύο περιπτώσεις, τα σημεία που χρησιμοποιούνται για την παρεμβολή είναι αυτό που υπολογίστηκε στο προηγούμενο βήμα της Μόντε Κάρλο εκτιμήσης.

Πεπερασμένα Στοιχεία Το τελικό βήμα της διαδικασίας είναι η λύση του κάθε υποπροβλήματος (που αντιστοιχεί σε κάθε υπο-περιοχή) χρησιμοποιώντας ένα λύτη πεπερασμένων στοιχείων. Σαφώς, οι υπολογισμοί για κάθε υπο-πρόβλημα εκτελούνται παράλληλα.

[1] `http://www.sintef.no/upload/IKT/9011/geometri/MBA/mba-1.1.tgz`

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

Χρησιμοποιούμε την C++ βιβλιοθήκη deal.II[2]. Αυτή η πρόσφατα αναπτυχθήσα βιβλιοθήκη και ήδη ευρέως χρησιμοποιούμενη βιβλιοθήκη [1] προσφέρει προσαρμοστικούς λύτες πεπερασμένων στοιχείων υψηλής ποιότητας για την αριθμητική επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων.[3]

4 Παραδοτέα

Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση Το παρόν κείμενο.

Παραδοτέο 2.3.2 Δημοσιεύσεις Τα έως τώρα αποτελέσματα της δράσης έχουν παρουσιαστεί σε διεθνή συνέδρια.

Παραδοτέο 2.3.3 Λογισμικό Έχει δοθεί στους συνεργάτες όλων των ομάδων του έργου μια αρχική υλοποίηση του λογισμικού στο επίπεδο του Beta testing.

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.

Στους συναδέλφους των άλλων ομάδων έχει δοθεί μια καταρχήν υλοποίηση της γενικότερης μεθοδολογίας.

6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

Το επόμενο βήμα στην αναφερόμενη ενότητα είναι η πλήρη ανάπτυξη και η αρχική αξιολόγηση του βασικού υβριδικού αλγορίθμου.

[2] `http://www.dealii.org/`

[3] Η C++ κλάση μας `LaplaceSolve` βασίζεται στην κλάση `LaplaceProblem`, που υλοποιήθηκε στο 4ο βήμα του tutorial, στο documentation της έκδοσης 6.1.0 της βιβλιοθήκης.

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

Αναφορές

[1] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II—A general-purpose object-oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4):1–24, 2007.

[2] J. M. DeLaurentis and L. A. Romero. A Monte Carlo method for Poisson's equation. *J. Comput. Phys.*, 90(1):123–140, 1990.

[3] S. Lee, G. Wolberg, and S. Shin. Scattered data interpolation with multilevel B-splines. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 3(3):228–244, 1997. cited By (since 1996) 175.