

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 3.1

Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud



Πίνακας Περιεχομένων

1. ΣΚΟΠΟΣ	3
1.1. ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ CLUSTERS, GRIDS ΚΑΙ CLOUD	3
1.2. ΣΥΓΚΕΡΑΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ	3
2. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ	4
2.1. ΜΕΘΟΔΟΙ ΧΑΛΑΡΩΣΗΣ ΣΤΗ ΔΙΕΠΑΦΗ	4
2.1.1. Εισαγωγή	4
2.1.2. Διακριτοποίηση πεδίου με επαναληπτική χαλάρωση στις διεπαφές.....	5
2.1.3. Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή.....	8
2.2. ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΕΝΟΣ ΥΒΡΙΔΙΚΟΥ ΠΑΡΑΛΛΗΛΟΥ MONTE CARLO ΕΠΙΛΥΤΗ ΜΔΕ ΣΕ ΟΡΘΟΓΩΝΙΑ ΠΟΛΛΑΠΛΑ ΠΕΔΙΑ	14
2.2.1 Εισαγωγή.....	14
2.2.2. Ανάλυση βασικού αλγορίθμου.....	14
Περιγραφή βασικού αλγορίθμου	14
Profiling βασικού κώδικα.....	15
2.2.3. Υβριδική προσέγγιση παραλληλοποίησης.....	16
3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	17
3.1. ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΘΟΔΩΝ ΧΑΛΑΡΩΣΗΣ ΣΤΗ ΔΙΕΠΑΦΗ	17
3.2. ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΣΕ CLUSTERS ΠΑΝΩ ΑΠΟ CLOUD	18
3.3. ΣΥΓΚΕΡΑΣΜΟΣ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΩΝ ΜΕΘΟΔΩΝ ΚΑΙ ΛΟΓΙΣΜΙΚΟΥ	22
4. ΠΑΡΑΔΟΤΕΑ	22
5. ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ	22
6. ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΕΙΣ	22
7. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	23



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



1. Σκοπός

Η Δράση 3 αναφέρεται γενικά στη χρήση σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών αφενός μεν στην υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων και του αντίστοιχου επιστημονικού λογισμικού, που θα αναπτυχθούν στα πλαίσια της Δράσης 2 (ιδιαίτερα 2.2 και 2.3), αφετέρου δε στην ανάπτυξη της πλατφόρμας λογισμικού της Δράσης 4. Η υλοποίησή του πραγματοποιείται από δύο διαφορετικές δράσεις (3.1 και 3.2), ανάλογα με την κατηγορία αρχιτεκτονικών που χρησιμοποιούνται, των οποίων η οργάνωση και ανάλυση σε μορφή δράσεων ακολουθεί.

1.1. Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud

Αντικείμενο της συγκεκριμένης δράσης αποτελεί η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλής φυσικής σε σύγχρονες παράλληλες αρχιτεκτονικές.

Αρχικά η υλοποίηση θα γίνει σε επίπεδο συστοιχιών υπολογιστών (Clusters). Η υλοποίηση των μεθόδων αφορά τόσο σε ομοιογενή, συμμετρικά σχήματα όπου γίνεται χρήση ενός συγκεκριμένου προγραμματιστικού μοντέλου ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI), όσο και σε ετερογενή, μη συμμετρικά σχήματα, όπου ο παραλληλισμός των μεθόδων θα επιτελείται σε πολλαπλά επίπεδα. Σύμφωνα με αυτά τα συνεργατικά σχήματα θα εφαρμοστεί συνδυασμός μοντέλων ανταλλαγής μηνυμάτων (MPI) με μοντέλα προγραμματισμού κοινής μνήμης (OpenMP, Pthreads) για την περισσότερο ευέλικτη αξιοποίηση των επεξεργαστών πολλαπλών πυρήνων που περιέχονται σε κάθε κόμβο του Cluster.

Κατά το επόμενο στάδιο της συγκεκριμένης δράσης η υλοποίηση θα γίνει σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (web services). Στη περίπτωση αυτή το παρεχόμενο λογισμικό θα είναι σε θέση να αξιοποιεί με καλύτερο τρόπο τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, ιδιαίτερα κατά την περίπτωση όπου υποβάλλονται μέσω του Cloud αιτήσεις για παράλληλη εκτέλεση από περισσότερους του ενός χρήστες.

1.2. Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού.

Κεντρική επιδίωξη της Δράσης 4 είναι η σχεδίαση μιας αρχιτεκτονικής η οποία θα θέσει τις βάσεις για μια ενοποιημένη προσέγγιση αντιμετώπισης των σύνθετων προβλημάτων που μας απασχολούν καλύπτοντας τόσο την αναγκαιότητα σχεδίασης/ανάπτυξης λογισμικού με δυνατότητα ενσωμάτωσης σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων όσο και ανάπτυξης ενός λειτουργικού περιβάλλοντος επίλυσης σύνθετων προβλημάτων, το οποίο ενσωματώνει μεθόδους και λογισμικό της



Δράσης 3, επιτρέπει την εκμετάλλευση των σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και διευκολύνει την αποδοτική χρήση των λογισμικών μονάδων. Η αρχιτεκτονική αυτή θα προσαρμοστεί σε ήδη υπάρχουσα πλατφόρμα ανοικτού λογισμικού (FEniCS) και το περιβάλλον αυτό θα αποτελέσει και την πλατφόρμα αξιολόγησης των μεθόδων επίλυσης σύνθετων ΜΔΕ και δυνητικά την επικύρωσή τους σε σημαντικά προβλήματα της Περιβαλλοντικής Μηχανικής και της Ιατρικής.

2. Μεθοδολογία

2.1. Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή

2.1.1. Εισαγωγή

Οι διάφορες μέθοδοι διακριτοποίησης πεδίου που έχουν πρόσφατα αναπτυχθεί για την αποδοτική επίλυση ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων μπορούν εύκολα να ταξινομηθούν σε δύο κατηγορίες: επικαλυπτόμενες και μη επικαλυπτόμενες. Και οι δύο προσεγγίσεις έχουν ήδη χρησιμοποιηθεί για να μοντελοποιήσουν αποτελεσματικά μεγάλης κλίμακας, βιομηχανικά, προβληματικών συνθηκών προβλήματα. Παρόλα αυτά θεωρείται ότι απαιτείται επιπλέον θεωρητική και πειραματική ανάλυση ώστε να γίνουν πρακτικές αυτές οι μέθοδοι και χρήσιμα εργαλεία για τους μη ειδήμονες.

Τα επικαλυπτόμενα (Schwartz) σχήματα έχουν στο παρελθόν λάβει μεγάλη προσοχή. Άρθρα που κάνουν ανασκόπηση και συγκρίνουν διάφορα τέτοια σχήματα [1] και ερευνούν τις σχετιζόμενες στρατηγικές preconditioning [2, 3] υπάρχουν ήδη στη βιβλιογραφία. Σχετικά πρόσφατα ένας αριθμός μελετών έχουν δείξει ότι τα μη επικαλυπτόμενα σχήματα μπορούν να συμπεριφερθούν καλά και μπορούν πιθανά να ελευθερώσουν τους χρήστες από συγκεκριμένες πολυπλοκότητες στη διατύπωση και στην υλοποίησή τους. Η σύγκριση των κυριότερων χαρακτηριστικών αυτών των δύο κατηγοριών μεθόδων και η ύπαρξη σχέσεων ισοδυναμίας ανάμεσά τους έχει ήδη μελετηθεί αρκετά [4, 5, 6].

Οι μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή μας πάνε ένα βήμα παραπέρα από τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους διακριτοποίησης πεδίου [7]. Σε μια προσπάθεια να μιμηθούν τη φυσική του προβλήματος στον πραγματικό κόσμο, σπάνε μια πολύπλοκη μερική διαφορική εξίσωση (ΜΔΕ) που δρα σε ένα μεγάλο ή/και πολύπλοκο πεδίο σε ένα σύνολο προβλημάτων ΜΔΕ με διαφορετικούς αλλά απλούς τελεστές που δρουν σε διαφορετικά μικρότερα και εύκολα υποπεδία. Το πολλαπλών πεδίων, πολλαπλών ΜΔΕ σύστημα είναι σωστά συζευγμένο χρησιμοποιώντας τελεστές εξομάλυνσης στα όρια μεταξύ των υποπεδίων.

Από την οπτική της χαλάρωσης στη διεπαφή αυτές οι μέθοδοι αποτελούνται από τη διαμέριση του πεδίου σε ένα σύνολο από μη επικαλυπτόμενα υποπεδία και από την επιβολή κάποιων οριακών συνθηκών στα όρια των διεπαφών που ορίζονται από αυτήν τη διαμέριση. Στη συνέχεια χρησιμοποιώντας αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές επιλύεται το σύνολο των συνεπαγόμενων προβλημάτων ΜΔΕ. Οι λύσεις που



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



προκύπτουν δεν ικανοποιούν τις οριακές συνθήκες των διεπαφών και εφαρμόζεται χαλάρωση στις διεπαφές για να αποκτήσουμε νέες τιμές στα όρια των διεπαφών, που να ικανοποιούν καλύτερα τις συνθήκες και λύνουμε τις ΜΔΕ με αυτές τις νέες τιμές. Τα παραπάνω βήματα επαναλαμβάνονται μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

Οι περισσότερες από τις γνωστές μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή απαριθμούνται παρακάτω με την αλφαβητική σειρά των ακρωνυμίων τους:

- **AVE** Μια απλή μέθοδος που παίρνει το μέσο όρο της λύσης και της κανονικής της παραγώγου κατά μήκος των διεπαφών.
- **GEO** Μια μέθοδος που βασίζεται σε μια απλή γεωμετρική συστολή.
- **NEW** Ένα σχήμα που βασίζεται στη μέθοδο Newton για να διορθώνει τις τιμές στις διεπαφές.
- **ROB** Ένας αλγόριθμος που χρησιμοποιεί τις Robin συνθήκες στις διεπαφές για εξομάλυνση.
- **SCO** Ένα σχήμα που βασίζεται σε (αλλά δεν έχει διατυπωθεί με) μια προσέγγιση συμπληρώματος Schur.
- **SHO** Μια μέθοδος βασισμένη στη γενική ιδέα της shooting μεθόδου για την επίλυση των συνήθων διαφορικών εξισώσεων (ΣΔΕ)
- **SPO** Μια μέθοδος που προέρχεται από τη χρήση του τελεστή Steklov-Poincaré που περιλαμβάνει εναλλαγή τύπων οριακών συνθηκών.

2.1.2. Διακριτοποίηση πεδίου με επαναληπτική χαλάρωση στις διεπαφές

Επί του παρόντος, ο χώρος της διακριτοποίησης πεδίου αποτελείται από δύο μέρη - τις επικαλυπτόμενες και τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους. Οι επικαλυπτόμενες – επίσης γνωστές και ως Schwartz – ήταν οι πρώτες που χρησιμοποιήθηκαν και έχουν αποδείξει ήδη ότι είναι πολύ αποδοτικές αριθμητικές διαδικασίες που χαίρουν συγκεκριμένων πολύ επιθυμητών ιδιοτήτων σύγκλισης. Παρ' όλα αυτά, έχει επίσης παρατηρηθεί ότι έχουν διάφορα πολύ σημαντικά μειονεκτήματα που απαγορεύουν τη χρήση τους για συγκεκριμένες εφαρμογές. Για παράδειγμα, σχεδόν όλες εκ των πολλών προτεινόμενων μεθόδων διακριτοποίησης πεδίου για την επίλυση μοντέλων διάδοσης κυμάτων είναι είτε μη επικαλυπτόμενες, είτε χαλάρωσης στη διεπαφή [8, 9, 10, 11].

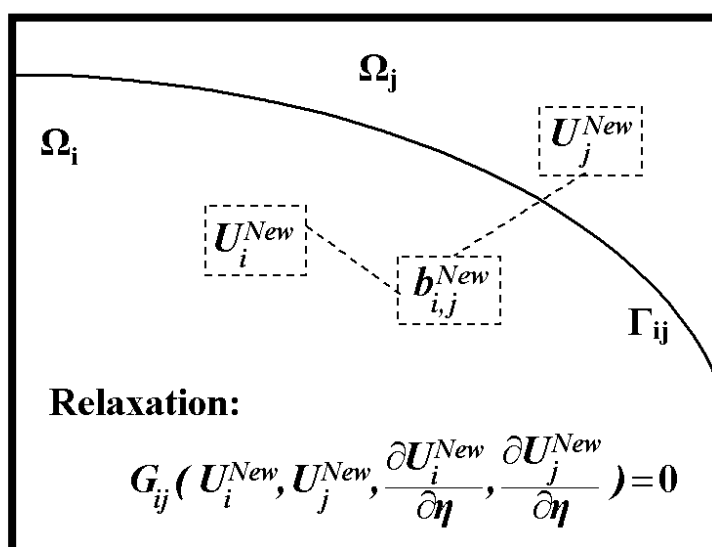
Οι μη επικαλυπτόμενες μέθοδοι παρουσιάζουν συγκεκριμένα πλεονεκτήματα σε σχέση με τις επικαλυπτόμενες. Πιο συγκεκριμένα:

- Δεν είναι ευαίσθητες σε άλματα στους συντελεστές του τελεστή. Η συμπεριφορά σύγκλισής τους και οι υπολογισμοί θεωρητικού σφάλματός τους παραμένουν ίδια ακόμα και αν ο διαφορικός τελεστής περιλαμβάνει ασυνεχείς συντελεστές, αρκεί τα άλματα να συμβαίνουν κατά μήκος των γραμμών των διεπαφών [12].
- Έχουν μικρότερο κόστος (επιβάρυνση) επικοινωνίας σε μια παράλληλη υλοποίηση σε κατανεμημένης μνήμης πολυεπεξεργαστικά συστήματα. Το κόστος της επικοινωνίας είναι αναλογικό με το μήκος των γραμμών των διεπαφών, τη στιγμή που στις επικαλυπτόμενες μεθόδους είναι αναλογικό με την επικαλυπτόμενη περιοχή [13].

- Η καταγραφή/συντήρηση είναι σχετικά ευκολότερη για τη διαμέριση και το χειρισμό των σχετικών δομών δεδομένων απ' ότι στις πολύπλοκες και ακριβές επικαλυπτόμενες μεθόδους [13].

Υπάρχουν δύο κύριες οπτικές για τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους, το preconditioning και η χαλάρωση στη διεπαφή. Μια εις βάθος έρευνα για τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους διακριτοποίησης πεδίου αναλυμένες από την οπτική του preconditioning μπορεί να βρεθεί στο [14] και μια γενική διατύπωση και ανάλυση των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή στο [15]. Για την αναγνώριση των κύριων χαρακτηριστικών τους, ακολουθεί μια σύντομη περιγραφή των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.

Η χαλάρωση στη διεπαφή είναι ένα βήμα πέρα από τις μη επικαλυπτόμενες μεθόδους (ακολουθώντας τη χαλάρωση του Southwell του 1930), αλλά στη ΜΔΕ αντί για το επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας, για να διατυπώσει τη χαλάρωση σαν επαναλαμβανόμενες διαδικασίες εξομάλυνσης της διεπαφής. Ένα σύνθετο φυσικό φαινόμενο αποτελείται από μια συλλογή απλών μερών με καθένα να υπακούει έναν μεμονωμένο φυσικό νόμο τοπικά και να μοιράζεται τις συνθήκες των διεπαφών του με γείτονες. Η χαλάρωση στη διεπαφή χωρίζει το πεδίο σε ένα σύνολο μη επικαλυπτόμενων πεδίων και επιβάλλει κάποιες οριακές συνθήκες στη διεπαφή ανάμεσα στις γραμμές των υποπεδίων. Δοθείσης μιας αρχικής μαντεψιάς, μιμείται τη φυσική του πραγματικού κόσμου επιλύοντας τα τοπικά προβλήματα ακριβώς σε κάθε υποπεδίο και χαλαρώνοντας τις οριακές τιμές για να πάρει καλύτερους υπολογισμούς των σωστών συνθηκών στη διεπαφή. Αυτή η διαδικασία παρουσιάζεται στην εικόνα 1, όπου ο γενικός τύπος χαλάρωσης G_{ij} (που βασίζεται στις τρέχουσες τοπικές λύσεις U_i^{New} και U_j^{New} των δύο γειτονικών υποπεδίων Ω_i και Ω_j) υπολογίζει διαδοχικές προσεγγίσεις της λύσης $b_{i,j}^{New}$ στη διεπαφή Γ_{ij} ανάμεσά τους.



Εικόνα 1: Ο μηχανισμός χαλάρωσης στη διεπαφή

Για την επίσημη περιγραφή της μεθόδου θεωρούμε το ακόλουθο πρόβλημα:

$$Du = f \text{ in } \Omega, \quad Bu = c \text{ on } \partial\Omega \quad (1)$$

όπου το D είναι ένας ελλειπτικός, μη γραμμικός γενικά, διαφορικός τελεστής και το B είναι ένας τελεστής συνθήκης που ορίζεται στο όριο $\partial\Omega$ ενός ανοιχτού πεδίου $\Omega \in R^d, d = 1, 2, \dots$. Αυτό το πεδίο διαμερίζεται σε p ανοιχτά υποπεδία $\Omega_i, i = 1, \dots, p$ τέτοια ώστε $\Omega = \bigcup_{i=1}^p \overline{\Omega}_i \setminus \partial\Omega$ και $\bigcap_{i=1}^p \Omega_i = \emptyset$. Για λόγους που σχετίζονται είτε με τα φυσικά χαρακτηριστικά του προβλήματος, είτε με τους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους, κάποιος θα ήθελε να αντικαταστήσει την (1) με το ακόλουθο σύστημα χαλαρά συνδεδεμένων διαφορικών προβλημάτων:

$$\begin{aligned} D_i u &= f_i \text{ in } \Omega_i, \\ G_{i,j} u &= 0 \text{ on } \partial\Omega_i \cap \partial\Omega_j \setminus \partial\Omega \quad \forall j \neq i, \quad B_i u = c_i \text{ on } \partial\Omega_i \cap \partial\Omega \end{aligned} \quad (2)$$

όπου $i = 1, \dots, p$. Αυτά τα διαφορικά προβλήματα συνδέονται μέσω των συνθηκών των διεπαφών $G_{i,j} u = 0$ και περιλαμβάνουν τους περιορισμούς D_i και B_i των ολικών διαφορικού και συνθήκης τελεστών D και B , αντίστοιχα σε κάθε υποπεδίο, με κάποιους από αυτούς γραμμικούς και άλλους μη γραμμικούς. Οι συναρτήσεις f_i και c_i είναι ανάλογοι περιορισμοί των συναρτήσεων f και c . Ο τοπικός τελεστής διεπαφής $G_{i,j}$ σχετίζεται με τη μέθοδο χαλάρωσης στη διεπαφή και διαφορετικές επιλογές για τα $G_{i,j}$ οδηγούν σε διαφορετικά σχήματα χαλάρωσης. Στην παρούσα μελέτη θα αναφερθούμε σε διάφορες μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή που έχουν τα ακόλουθα χαρακτηριστικά:

- Αποσυνθέτουν αρχικά το πρόβλημα (1) στο διαφορικό επίπεδο και στη συνέχεια διακριτοποιούν τα προκύπτοντα διαφορικά υποπροβλήματα (2).
- Έχουν την ευελιξία να χρησιμοποιούν το καταλληλότερο σχήμα διακριτοποίησης για κάθε υποπρόβλημα.
- Δεν επικαλύπτουν τα υποπεδία Ω_i .
- Με χρήση καλών παραμέτρων χαλάρωσης στο $G_{i,j}$ είναι αρκετά γρήγορες, ώστε να μη χρειάζεται preconditioning.
- Απλοποιούν τη γεωμετρία και τη φυσική του υπολογισμού λαμβάνοντας υπόψη τα υποπροβλήματα (2) και όχι το συνολικό διαφορικό πρόβλημα (1).
- Μπορούν να χρησιμοποιούν τμήματα λογισμικού ξαναχρησιμοποιώντας τμήματα λογισμικού επιλυτών για την επίλυση των μεμονωμένων υποπροβλημάτων (2).
- Είναι γενικοί και ισχυροί.

Υπάρχουν διάφορα ερωτήματα με πρόκληση που αφορούν πρακτικές εφαρμογές τέτοιων μεθόδων, όπως το να βρίσκεις τον καταλληλότερο χαλαρωτή για ένα συγκεκριμένο πρόβλημα, να καθορίζεις το πεδίο εφαρμογής καθενός, να εξηγείς την αλληλεπίδραση ανάμεσα στη μαθηματική επανάληψη και τη μέθοδο αριθμητικής επίλυσης, να επιλέγεις καλές ή βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους χαλάρωσης, κλπ.

Αξίζει να σημειωθεί ότι εφόσον όλες οι μέθοδοι αποσυνθέτουν και χαλαρώνουν τις τιμές των διεπαφών στο συνεχές επίπεδο, η ανάλυση σύγκλισης αυτών των μεθόδων χρειάζεται να γίνει επίπεδο των ΜΔΕ (συνεχές) και άρα είναι ένα πρόβλημα μαθηματικής ανάλυσης και όχι αριθμητικής.

2.1.3. Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή

Εξαιτίας της εγγενούς αφαίρεσης, είναι σχετικά εύκολο να περιγραφούν οι μέθοδοι λείανσης των διεπαφών τόσο στο επίπεδο της έννοιας, όσο και στο αλγοριθμικό. Στη συνέχεια της υποενότητας παρουσιάζονται επτά μέθοδοι με την υψηλού επιπέδου αλγοριθμική τους περιγραφή. Για λόγους απλότητας στην παρουσίαση των αλγορίθμων θεωρούμε μόνο μονοδιάστατο (κατά μήκος του άξονα x) διαχωρισμό του πεδίου. Οπότε κάθε υποπεδίο έχει δύο γραμμές διεπαφών με τα δύο γειτονικά υποπεδία. Το βασικό μπλοκ κώδικα των αλγορίθμων είναι η διαδικασία $u = \text{solve_pde}(ui, dui)$ που υπολογίζει τη λύση u ενός τοπικού σε ένα υποπεδίο προβλήματος ΜΔΕ με Dirichlet, Neumann ή Robin οριακές συνθήκες στη διεπαφή με ui τιμή στη διεπαφή και dui παράγωγο στη διεπαφή. Τα R και L υποδεικνύουν δεξιά και αριστερά υποπεδία ή διεπαφές, αντίστοιχα και το u_i τη λύση του προβλήματος που σχετίζεται με το υποπεδίο Ω_i .

Η μέθοδος Dirichlet/Neumann Averaging (AVE)

Είναι ένα από τα πιο απλά σχήματα και αποτελείται από δύο περάσματα επίλυσης ΜΔΕ μαζί με δύο βήματα χαλάρωσης διεπαφών. Στο πρώτο πέρασμα το Dirichlet πρόβλημα λύνεται σε όλα τα υποπεδία. Στη συνέχεια η διαδικασία χαλάρωσης λειαίνει τις παραγώγους κατά μήκος των διεπαφών υπολογίζοντας την κανονική παράγωγο σαν ένα συνδυασμό των προηγούμενων υπολογισμένων κανονικών παραγώγων των δύο γειτονικών υποπεδίων. Αυτές οι εκτιμήσεις χρησιμοποιούνται στη συνέχεια σαν οριακές συνθήκες στο δεύτερο πέρασμα επίλυσης ΜΔΕ, όπου το πρόβλημα Neumann επιλύεται σε όλα τα υποπεδία. Το δεύτερο βήμα χαλάρωσης ακολουθεί και υπολογίζει εκτιμήσεις της άγνωστης συνάρτησης στις διεπαφές παίρνοντας ένα συνδυασμό των προηγούμενων λύσεων στα γειτονικά υποπεδία. Αυτές οι εκτιμήσεις πρόκειται να γίνουν είσοδοι στην επόμενη επανάληψη του Dirichlet περάσματος. Αυτή η μέθοδος, που μπορεί να θεωρηθεί μια μέθοδος δύο βημάτων, περιγράφεται αλγοριθμικά ως εξής:

for $k = 0, 1, 2, \dots$

- $u^{(k+\frac{1}{2})} = \text{solve_pde}(ui)$ σε κάθε υποπεδίο
- $dui = \beta \frac{\partial u_R^{(k+\frac{1}{2})}}{\partial x} + (1 - \beta) \frac{\partial u_L^{(k+\frac{1}{2})}}{\partial x}$ σε κάθε διεπαφή
- $u^{(k+1)} = \text{solve_pde}(dui)$ σε κάθε υποπεδίο
- $ui = \alpha u_R^{(k+1)} + (1 - \alpha) u_L^{(k+1)}$ σε κάθε διεπαφή



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

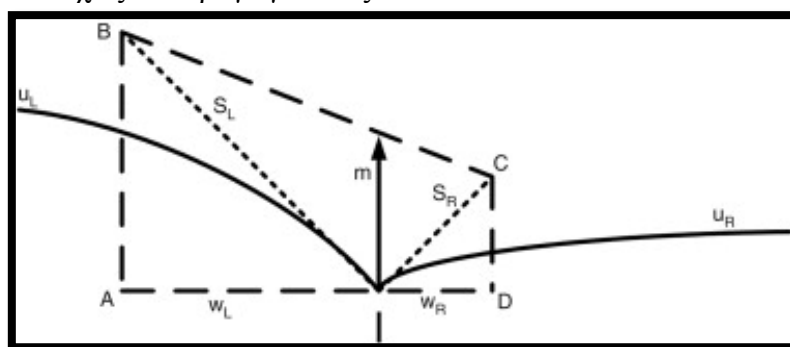
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



όπου $\alpha, \beta \in (0,1)$ είναι οι παράμετροι χαλάρωσης. Υπάρχει ένας αριθμός θεωρητικών μελετών για τη σύγκλιση του παραπάνω σχήματος [18]. Πιο συγκεκριμένα, στο [19] πραγματοποιείται η ανάλυση σύγκλισης της μεθόδου στο διαφορικό επίπεδο χρησιμοποιώντας Hilbert space τεχνικές. Στο [20] η Galerkin πεπερασμένων στοιχείων μέθοδος και η υβριδική μικτή πεπερασμένων στοιχείων μέθοδος χρησιμοποιούνται για να δώσουν διακριτές εκδοχές της μεθόδου. Ανάλυση Fourier χρησιμοποιείται στο [91] για να δώσει ακριβή αποτελέσματα σύγκλισης και να υπολογίσει βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους χαλάρωσης σε απλά προβλήματα μοντέλα.

Η Geometric (GEO) Contraction Based μέθοδος

Η GEO υπολογίζει τη νέα λύση για κάθε υποπεδίο επιλύοντας ένα Dirichlet πρόβλημα και κατηγοριοποιείται σαν μία μέθοδος ενός βήματος. Οι τιμές στις διεπαφές λαμβάνονται προσθέτοντας στις παλιές ένα γεωμετρικά σταθμισμένο συνδυασμό των κανονικών οριακών παραγώγων των γειτονικών υποπεδίων. Πιο συγκεκριμένα, στην εικόνα 2 θεωρούμε μια μονοδιάστατη περίπτωση και με τα u_L και u_R τις λύσεις των διαφορικών προβλημάτων που σχετίζονται με το πεδίο αριστερά και δεξιά ενός σημείου διεπαφής I, αντίστοιχα. Ας υποθέσουμε ότι είναι ίσες στο I (αν όχι, μπορούμε να πάρουμε το μέσο όρο τους στο I) αλλά οι κλίσεις τους δεν ταιριάζουν, εκτός και αν προσθέσουμε έναν όρο διόρθωσης m , όπως αναπαρίσταται γραφικά στην εικόνα 1. Για να υπολογίσουμε το m θεωρούμε τα δύο τρίγωνα IAB και CDI των οποίων τα ύψη h_L και h_R δίνονται πολλαπλασιάζοντας την αντίστοιχη εφαπτομένη (ή ισοδύναμα την κανονική παράγωγο) με τη βάση του τριγώνου. Τα w_L και w_R είναι τα πλάτη που θεωρούμε για την εγκυρότητα των κλίσεων S_L και S_R , αντίστοιχα στο I. Μπορούν να επιλεγούν αυθαίρετα ή να παίξουν το ρόλο μιας παραμέτρου χαλάρωσης που μπορεί να αλλάζει δυναμικά από επανάληψη σε επανάληψη. Οι νέες τιμές των διεπαφών μπορούν τώρα να υπολογιστούν προσθέτοντας ένα σταθμισμένο μέσο όρο των υψών στις παλιές τιμές των διεπαφών. Αφαιρετικά, η περιγραφείσα μορφή χαλάρωσης μπορεί να ειπωθεί να τραβάμε τις συναρτήσεις u_L και u_R από το σημείο I και κατά m προς τα πάνω μέχρι να γίνουν συνεχείς οι παράγωγοί τους.



Εικόνα 2: Ο μηχανισμός χαλάρωσης της μεθόδου GEO

Η GEO μπορεί αλγοριθμικά να αποδοθεί ως εξής:

for $k = 0, 1, 2, \dots$

- $ui^{(k+1)} = \frac{u_L^{(k)} + u_R^{(k)}}{2} - \frac{w_L w_R}{w_L + w_R} \left(\frac{\partial u_L^{(k)}}{\partial x} - \frac{\partial u_R^{(k)}}{\partial x} \right)$ σε κάθε διεπαφή
- $u^{(k+1)} = \text{solve_pde}(ui^{(k+1)})$ σε κάθε υποπεδίο

Η θεωρητική ανάλυση της μεθόδου τόσο στο συνεχές (διαφορικό) όσο και στο διακριτό (γραμμικής άλγεβρας) επίπεδο για την επίλυση ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων παρουσιάζεται στο [22]. Εκεί αποδεικνύεται η σύγκλιση της μεθόδου για μονοδιάστατα προβλήματα. Η περιοχή σύγκλισης και οι βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους χαλάρωσης καθορίζονται για προβλήματα μοντέλα. Αριθμητικά δεδομένα για μονοδιάστατα και δισδιάστατα προβλήματα που επιβεβαιώνουν τα θεωρητικά αποτελέσματα, διερευνούν την αποτελεσματικότητα της μεθόδου και διαφωτίζουν τα χαρακτηριστικά της παρουσιάζονται επίσης.

Η μέθοδος Newton (NEW)

Μια ακόμα νέα ιδέα είναι η χρήση της διακριτής μεθόδου Newton για την ανανέωση των τιμών στη διεπαφή σύμφωνα με την ακόλουθη διαδικασία:

Βήμα 0: Για $i = 1, 2$,

μάντεψε τις $u_R^{(i)}, u_L^{(i)}$ στις διεπαφές και υπολόγισε τα $\frac{\partial u_L^{(i)}}{\partial x}, \frac{\partial u_L^{(i)}}{\partial x}$

Βήμα 1: Υπολόγισε τα δ_L και δ_R ώστε σε όλες τις διεπαφές να έχουμε:

$$(u_L^{(2)} + \delta_L) - (u_R^{(2)} + \delta_R) = 0$$

$$\frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x} (u_L^{(2)} + \delta_L) - \frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} (u_R^{(2)} + \delta_R) = 0$$

Βήμα 2: Εφάρμοσε γραμμικοποίηση για να επιλύσεις προσεγγιστικά τις εξισώσεις:

$$(u_L^{(2)} + \delta_L) - (u_R^{(2)} + \delta_R) = 0$$

$$\frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x} (u_L^{(2)}) \left[1 + \frac{\partial}{\partial u_L} \left(\frac{\partial u_L}{\partial x} \right) \delta_L \right] - \frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} (u_R^{(2)}) \left[1 + \frac{\partial}{\partial u_R} \left(\frac{\partial u_R}{\partial x} \right) \delta_R \right] = 0$$

Βήμα 3: Προσέγγισε τις άγνωστες παραγώγους με διαφορές:

$$\frac{\partial}{\partial u_L} \left(\frac{\partial u_L}{\partial x} \right) = \frac{\frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial u_L^{(1)}}{\partial x}}{u_L^{(2)} - u_L^{(1)}} = A_L$$



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



$$\frac{\partial}{\partial u_R} \left(\frac{\partial u_R}{\partial x} \right) = \frac{\frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial u_R^{(1)}}{\partial x}}{u_R^{(2)} - u_R^{(1)}} = A_R$$

Βήμα 4: Λύσε ως προς δ_L και δ_R

$$\delta_L - \delta_R = u_R^{(2)} - u_L^{(2)} = 0$$

$$A_L \delta_L - A_R \delta_R = \frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x}$$

$$\text{ώστε } \delta_L = \delta_R = \delta = \left[\frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x} \right] / (A_L - A_R).$$

Οι τιμές των $\frac{\partial u_L}{\partial x}$ και $\frac{\partial u_R}{\partial x}$ εξαρτώνται από τις u_L και u_R για όλες τις διαφορικές εξισώσεις παραπάνω. Στο πνεύμα της παραπάνω διαδικασίας, η μέθοδος NEW μπορεί να περιγραφεί ως εξής:

for $k = 2, 3, 4 \dots$

- Λύσε τις διορθώσεις $\delta_L = \delta_R = \delta$ από το σύστημα των διεπαφών:
 - $(u_L^{(k)} + \delta_L) - (u_R^{(k)} + \delta_R) = 0$
 - $\frac{\partial u_L^{(k)}}{\partial x} (u_L^{(k)} + \delta_L) - \frac{\partial u_R^{(k)}}{\partial x} (u_R^{(k)} + \delta_R) = 0$
- $ui^{(k+1)} = ui^{(k)} + \delta$ σε κάθε διεπαφή
- $u^{(k+1)} = \text{solve_pde}(ui^{(k+1)})$ σε κάθε υποπεδίο

Δεν υπάρχει γενική ανάλυση σύγκλισης για αυτό το νέο ενός βήματος σχήμα που δεν περιλαμβάνει παραμέτρους χαλάρωσης. Αλλά όπως οι περισσότερες εφαρμογές της μεθόδου Newton αναμένεται να συγκλίνει πολύ γρήγορα σε κάποια γειτονιά της πραγματικής λύσης.

Η μέθοδος Robin Relaxation (ROB)

Μια ακόμα απλούστερη μέθοδος χαλάρωσης στη διεπαφή είναι αυτή που βασίζεται στις οριακές συνθήκες Robin για να μεταδώσει πληροφορία διαμέσου των ορίων των υποπεδίων. Προτάθηκε αρχικά στο [23] και αναλύθηκε αργότερα στο [24]. Επιλύεται η τοπική ΜΔΕ στα υποπεδία χρησιμοποιώντας συνθήκες Robin στις γραμμές των διεπαφών αντιστοιχίζοντας ένα συνδυασμό Dirichlet και Neumann δεδομένων από τα γειτονικά υποπεδία.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

for $k = 0, 1, 2, \dots$

Σε κάθε υποπεδίο λύσε:

- $Lu^{(k+1)} = f \in \Omega$ με
- $-\frac{\partial u^{(k+1)}}{\partial x} + \lambda u^{(k+1)} =$
 $-\frac{\partial u_L^{(k)}}{\partial x} + \lambda u_L^{(k)}$ στην αριστερή διεπαφή του υποπεδίου
- $\frac{\partial u^{(k+1)}}{\partial x} + \lambda u^{(k+1)} =$
 $\frac{\partial u_R^{(k)}}{\partial x} + \lambda u_R^{(k)}$ στη δεξιά διεπαφή του υποπεδίου

Εδώ το λ είναι μια παράμετρος χαλάρωσης. Η σύγκλιση αυτής της μεθόδου αναλύθηκε στο [23] στο διαφορικό επίπεδο υποθέτοντας αυθαίρετες αποσυνθέσεις και χρησιμοποιώντας εκτιμήσεις «ενέργειας». Ο καθορισμός αποδοτικών επιλογών για το λ είναι ένα ανοιχτό πρόβλημα. Παραλλαγές της παραπάνω μεθόδου έχουν εμφανιστεί τελευταία στη βιβλιογραφία. Πιο συγκεκριμένα στο [25] μια βασισμένη σε ADI παραλλαγή για την επιτάχυνση της σύγκλισης του σχήματος ROB προτείνεται και αναλύεται. Μια παραλλαγή της ROB, που επεκτείνει την εφαρμογή της και την απελευθερώνει από το πρόβλημα της διασταύρωσης σημείου, διατυπώνεται και αναλύεται στο [26]. Μια ακόμα παραλλαγή που χρησιμοποιεί και τις εφαπτομενικές παραγώγους εκτός από την κανονική παράγωγο για τη λείανση δίνεται στο [27] όπου βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους χαλάρωσης λαμβάνονται για ένα πρόβλημα μοντέλο.

Η μέθοδος Schur Complement (SCO)

Ανάμεσα στις πρώτες διαδικασίες χαλάρωσης στη διεπαφή που τράβηξαν την προσοχή των ερευνητών είναι αυτή που αναλύεται στο [16]. Εναλλάσσει Dirichlet και Neumann συνθήκες διεπαφών στο χώρο και μπορεί να περιγραφεί ως εξής:

for $k = 0, 1, 2, \dots$

- $u_{1L} = u, u_{1R} = \theta_1 u_2^{(k)} + (1 - \theta_1) u_1^{(k)}$
- $u_1^{(k+1)} = \text{solve_pde}(u_{1L}, u_{1R})$
- for $i = 2, \dots, p - 1$
 - $du_{iL} = \frac{\partial u_{i-1}^{(k+1)}}{\partial x}$
 - $u_{iR} = \theta_i u_{i+1}^{(k)} + (1 - \theta_i) u_i^{(k)}$
 - $u_i^{(k+1)} = \text{solve_pde}(u_{iR}, du_{iL})$
- $u_{pR} = u, du_{pL} = \frac{\partial u_{p-1}^{(k+1)}}{\partial x}$
- $u_p^{(k+1)} = \text{solve_pde}(u_{pR}, du_{pL})$

Εδώ το $\theta \in (0, 1)$ είναι μια παράμετρος χαλάρωσης. Η ανάλυση σύγκλισης στο διαφορικό επίπεδο για την περίπτωση της εξίσωσης Helmholtz με δύο μεταβλητές και μονοδιάστατες αποσυνθέσεις στο διαφορικό επίπεδο δίνεται στο [16] μαζί με εκφράσεις που οδηγούν σε βέλτιστες τιμές για το θ . Επίσης, δίνεται μια μέθοδος για να καθορίζονται δυναμικά, σε κάθε επανάληψη, τιμές για το θ για τη φασματική προσέγγιση συνεγκατάστασης των διαφορικών προβλημάτων. Η SCO είναι η μόνη τεχνική χαλάρωσης στη διεπαφή που έχει μέχρι τώρα επεκταθεί επιτυχώς και εφαρμοστεί σε τέταρτης τάξης ελλειπτικά προβλήματα [28].

Η μέθοδος Shooting (SHO)

Η συγκεκριμένη μέθοδος προτείνεται στο [29], όπου και διατυπώνεται αρχικά για μονοδιάστατα προβλήματα οριακών συνθηκών. Πραγματοποιείται επίσης η ανάλυση σύγκλισής της και βέλτιστες τιμές για τις παραμέτρους χαλάρωσης βρίσκονται για προβλήματα μοντέλα. Η βασική ιδέα είναι η σύνδεση των προβλημάτων στα υποπεδία επιλύοντας την ελλειπή εξίσωση $D(ui^{(k)}) \equiv \frac{\partial u_L^{(k)}}{\partial x} - \frac{\partial u_R^{(k)}}{\partial x} = 0$ στις διεπαφές χρησιμοποιώντας ένα σχήμα σταθερού σημείου (Picard) για την απόκτηση των νέων τιμών.

for $k = 0, 1, 2, \dots$

- $\alpha^{(k+1)} = \frac{a^{(k)} |D(ui^{(k+1)})|}{|D(ui^{(k)}) - D(ui^{(k+1)})|}$ σε κάθε διεπαφή
- $ui^{(k+2)} = ui^{(k)} - \alpha^{(k+1)} D(ui^{(k)})$ σε κάθε διεπαφή
- $u^{(k+2)} = \text{solve_pde}(ui^{(k+2)})$ σε κάθε υποπεδίο



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Η μέθοδος του Steklov-Poincaré τελεστή (NEW)

Η συγκεκριμένη μέθοδος αναφέρθηκε αρχικά στο [30], αλλά αναλύθηκε από την οπτική του preconditioning μόνο. Χρησιμοποιεί τον τελεστή Steklov-Poincaré για να εκτελέσει την διαδικασία λείανσης των κανονικών παραγώγων στις διεπαφές. Είναι μια μέθοδος δύο βημάτων και ο αλγόριθμος περιγράφεται αναλυτικά στην [30]. Από την οπτική της χαλάρωσης στη διεπαφή δεν υπάρχουν θεωρητικά αποτελέσματα για τη μέθοδο SPO.

2.2. Εφαρμογή ενός υβριδικού παράλληλου Monte Carlo επιλυτή ΜΔΕ σε ορθογώνια πολλαπλά πεδία

2.2.1 Εισαγωγή

Ο Monte Carlo αλγόριθμος παράγει ένα τυχαίο περίπατο, χρησιμοποιώντας μια προτεινόμενη πυκνότητα και περιλαμβάνει μια μέθοδο για την απόρριψη/αποδοχή των προτεινόμενων κινήσεων. Σήμερα χρησιμοποιείται σχεδόν σε κάθε πτυχή της επιστημονικής έρευνας. Οι Monte Carlo μέθοδοι προσέλκυαν πάντα τους ανθρώπους που εργάζονται στον τομέα της αριθμητικής επίλυσης ΜΔΕ. Αυτή η έλξη έχει εξελιχθεί με το πέρασμα των χρόνων σε συνδυασμό με τις ραγδαίες αλλαγές στην τεχνολογία, όπως ο παράλληλος υπολογισμός, τα clusters υπολογιστών κ.λπ. [34] [35] [36].

2.2.2. Ανάλυση βασικού αλγορίθμου

Περιγραφή βασικού αλγορίθμου

Το αρχικό βήμα προς την κατεύθυνση της αξιοποίησης της απόδοσης ενός cluster πολλαπλών πυρήνων ήταν η εκτέλεση ενός profiling της ακολουθιακής υλοποίησης για τον εντοπισμό hotspots στον κώδικα που θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε μείωση του χρόνου εκτέλεσης, αν παραλληλοποιούνταν αποτελεσματικά. Η ανάλυση απόδοσης βασίστηκε στην υλοποίηση των αλγορίθμων που προτείνονται στο Vavalis et al [37]. Η εν λόγω υλοποίηση είναι σε θέση να λύσει την εξίσωση Poisson με Dirichlet συνοριακές συνθήκες για 2D και 3D υπερ ορθογώνια πεδία, αλλά μπορεί εύκολα να επεκταθεί για να χρησιμοποιεί άλλες μεθόδους και πεδία. Ο αλγόριθμος είναι ένας υβριδικός αλγόριθμος με την έννοια ότι τόσο ντετερμινιστικές όσο και μη ντετερμινιστικές μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την επίλυση των πεδίων. Αρχικά, εφαρμόζεται μια πιθανοτική αποσύνθεση πεδίου για τον υπολογισμό εκτιμήσεων των τοπικών λύσεων κατά μήκος των ορίων του υποπεδίου με τη μέθοδο Monte Carlo [38] και στη συνέχεια εφαρμόζεται μια παρεμβολή στις εκτιμήσεις των τοπικών λύσεων. Ειδικότερα, για διδιάστατα πεδία χρησιμοποιείται η Burkardt's splines βιβλιοθήκη [40], ενώ η Multilevel B-spline (MBA) [41] βιβλιοθήκη χρησιμοποιείται ώστε τα τρισδιάστατα πεδία να σχηματίσουν τα όρια των νέων υποπεδίων. Τέλος, καθώς τα όρια των υποπεδίων είναι γνωστά ένας ντετερμινιστικός Laplace επιλυτής που χρησιμοποιεί τη

Deal.II [42] χρησιμοποιείται για να βρει τη λύση του προβλήματος για κάθε υποπεδίο. Η βασική υλοποίηση μπορεί να περιγραφεί με τον ακόλουθο ψευδοκώδικα.

Προσδιόρισε τις συντεταγμένες των κόμβων όλων των υποπεδίων

Για κάθε κόμβο

Δημιούργησε μια δουλειά

Ανάθεσε τη δουλειά σε ένα νήμα

Εκτέλεσε Monte Carlo για να υπολογίσεις

τις τιμές των κόμβων

Χρησιμοποίησε μια (2|3) διαστάσεων συνάρτηση

παρεμβολής για να βρεις νέα όρια

Για κάθε υποπεδίο

Δημιούργησε μια δουλειά

Ανάθεσε τη δουλειά σε ένα νήμα

Λύσε με Laplace επιλυτή

Πάραξε τα αποτελέσματα

Μια ενδιαφέρουσα λεπτομέρεια υλοποίησης είναι ότι παραλληλοποίηση διαμοιραζόμενης μνήμης ήδη υποστηρίζεται χρησιμοποιώντας τη Pthreads βιβλιοθήκη.

Profiling βασικού κώδικα

Πριν την παραλληλοποίηση κώδικα σε μια αρχιτεκτονική κατανεμημένης μνήμης, είναι σημαντικό να πραγματοποιηθεί ανάλυση απόδοσης (profiling) προκειμένου να γίνουν αντιληπτά τα σημεία όπου ο κώδικας σπαταλά χρόνο εκτέλεσης κατά την ακολουθιακή εκτέλεσης. Με αυτόν τον τρόπο, ο κώδικας μπορεί να υποδιαιρεθεί σε «πυρήνες» που μπορούν να αναλυθούν περαιτέρω για να προσδιορισθεί αν είναι δυνατή η παράλληλη αξιοποίηση των διαθέσιμων υπολογιστικών πόρων και εάν η παραλληλοποίηση κάποιου «πυρήνα» θα έχει σημαντική επίπτωση στη συνολική εκτέλεση του προγράμματος. Στα πλαίσια του έργου πραγματοποιήθηκε μια εκτενής ανάλυση απόδοσης, χρησιμοποιώντας μια σειρά από διαφορετικές διαμορφώσεις παραμέτρων για τα προβλήματα που χρησιμοποιήθηκαν (Πίνακας 1) και προσδιορίστηκαν τρεις πυρήνες που θα μπορούσαν ενδεχομένως να βελτιώσουν τη συνολική απόδοση, αν μπορούσε να υλοποιηθεί μια υλοποίηση κατανεμημένης μνήμης. Οι τρεις πυρήνες είναι ο Monte Carlo αλγόριθμος, ο αλγόριθμος Παρεμβολής και ο Επιλυτής Laplace. Καθώς για τα περισσότερα προβλήματα εισόδου ο Monte Carlo αλγόριθμος έπαιρνε από 50% έως 94% του χρόνου εκτέλεσης, οι προσπάθειές μας επικεντρώθηκαν σε μια αποτελεσματική παραλληλοποίηση του αλγορίθμου Monte Carlo με χρήση MPI [43].

Πρόβλημα	dim	Dlen	Subd	Dect	Decc	nppp	Btol
1	2D	1. 1.	2 4	n u	.3	12 12	1e-15
2	2D	1. 1.	2 4	n n	.3 .25 .5 .7	12 12	1e-15
3	2D	1. 1.	2 4	n n	.3 .25 .5 .7	12 12	1e-15
4	3D	1. 1.	3 3 2	u u	5 5 5 5	12 12	1e-15

		1.5		u			
5	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	u n u	.5 .55 5 5 5 5	5 5 5 5 7 7	1e-15
6	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	n n n	.5 .4 .5 .55 1.2 5 5 5 5	5 5 5 5 7 7	1e-15
7	3D	1. 1. 1.5	3 3 2	n n n	.5 .4 .5 .55 1.2 5 5 5 5	5 5 5 5 7 7	1e-15

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικά προβλημάτων εισόδου

Ο Πίνακας 1 παρουσιάζει τα κύρια χαρακτηριστικά των προβλημάτων εισόδου. Το *dim* αντιπροσωπεύει αν το πρόβλημα είναι διδιάστατο ή τρισδιάστατο, το *dlen* το μήκος του πεδίου κατά μήκος κάθε διάστασης, το *subd* τον αριθμό των υποπεδίων κατά μήκος κάθε διάστασης, το *dect* τον τύπο αποσύνθεσης για κάθε διάσταση με *u* να αντιπροσωπεύει την ομοιομορφη και *n* την ανομοιομορφη, το *decc* τις συντεταγμένες των διεπαφών που αντιστοιχούν σε κάθε διάσταση κατά μήκος της οποίας το πεδίο αποσυντίθεται ανομοιομορφα, το *hrrr* τον αριθμό των κόμβων σε μια διεπαφή κατά μήκος μιας διάστασης. Για διδιάστατα προβλήματα παίρνει 2 ορίσματα που αντιστοιχούν στις γραμμές αποσύνθεσης κατά μήκος της διάστασης Y και X αντίστοιχα, ενώ για τρισδιάστατα παίρνει 6 ορίσματα, με κάθε ζευγάρι να αντιστοιχεί στα επίπεδα αποσύνθεσης YZ, XZ και XY αντίστοιχα. Τέλος, το *btol* αντιπροσωπεύει την ανοχή στο όριο.

Ο Πίνακας 2 παρουσιάζει το ποσοστό του χρόνου εκτέλεσης της υλοποίησης διαμοιραζόμενης μνήμης για διάφορα μεγέθη περιπάτων των προβλημάτων εισόδου για τους προαναφερθέντες πυρήνες, με το MC να σημαίνει Monte Carlo, το I παρεμβολή και το LS επιλυτής Laplace.

Περίπατοι	5K			20K			80K		
Πρόβλημα	MC	I	LS	MC	I	LS	MC	I	LS
1	60%	-	5%	79%	-	4%	95%	-	5%
2	50%	-	10%	76%	-	3%	90%	-	5%
3	74%	-	9%	88%	-	4%	92%	-	4%
4	80%	13%	7%	85%	11%	4%	88%	5%	7%
5	70%	20%	10%	83%	9%	8%	90%	6%	4%
6	78%	12%	10%	84%	10%	6%	94%	3%	1%
7	74%	10%	6%	81%	11%	8%	90%	6%	4%

Πίνακας 2: Ανάλυση απόδοσης

2.2.3. Υβριδική προσέγγιση παραλληλοποίησης

Καθώς η βασική υλοποίηση ήδη υποστηρίζει παραλληλοποίηση διαμοιραζόμενης μνήμης του Monte Carlo και του Laplace επιλυτή με χρήση Pthreads, εστιάσαμε στην άμεση υλοποίηση μιας υβριδικής παράλληλης υλοποίησης με χρήση OpenMPI [39] για επικοινωνία μεταξύ διεργασιών. Βασισμένοι στα πειραματικά αποτελέσματα της ανάλυσης απόδοσης, συμπεράναμε ότι:

1. ένα απλό master/worker σχήμα ήταν αρκετό για να κατανείμει τον υπολογιστικό φόρτο του Monte Carlo πυρήνα ανάμεσα στις διεργασίες. Αυτό

οφείλεται στο ότι η δουλειά κάθε Monte Carlo νήματος καθορίζεται κυρίως από τον αριθμό των περιπάτων, οπότε μια δίκαιη κατανομή κόμβων μεταξύ των worker διεργασιών και άρα και η τοπική κατανομή κόμβων μεταξύ των νημάτων δεν θα δημιουργήσει κάποια ιδιαίτερη ανισορροπία φόρτου.

2. η master διεργασία μπορούσε αποδοτικά να υλοποιήσει τους πυρήνες της παρεμβολής και του επιλυτή Laplace για κάθε υποπεδίο τοπικά με χρήση νημάτων, αφού είχε πρώτα λάβει την απαιτούμενη εκτίμηση των σχετικών κόμβων από τις άλλες διεργασίες.

Η λογική του βασικού κώδικα μένει σχετικά अपараλλάκτη. Προστέθηκε μόνο ένα επίπεδο που κατανομίζει τον υπολογιστικό φόρτο και συλλέγει τα αποτελέσματα εκτίμησης από κάθε worker διεργασία.

3. Αποτελέσματα

Πραγματοποιήθηκε μελέτη απόδοσης του επιλυτή ΜΔΕ διαμοιραζόμενης μνήμης, η οποία εφαρμόστηκε σε ελλειπτικές ΜΔΕ (Poisson) σε ορθογώνια πολλαπλά πεδία τόσο σε δύο όσο και σε τρεις διαστάσεις. Πραγματοποιήθηκε υλοποίηση παράλληλου αλγορίθμου κατανεμημένης/ διαμοιραζόμενης μνήμης και πραγματοποιήθηκαν αναλυτικά πειράματα. Τα πειραματικά αποτελέσματα που ακολουθούν δείχνουν ότι μπορεί να επιτευχθεί μια αποδοτική υλοποίηση του αλγορίθμου και σε αρχιτεκτονικές κατανεμημένης μνήμης. Η υβριδική υλοποίηση καταφέρει να επιδείξει σημαντική επιτάχυνση, ενώ διατηρεί την ποιότητα της λύσης σε δείγματα συνόλων δεδομένων εισόδου.

3.1. Υλοποίηση μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή

Μία σύντομη μελέτη αξιολόγησης απόδοσης των μεθόδων μπορεί να βρεθεί στο [31] όπου παρουσιάζονται και συζητούνται αριθμητικά δεδομένα για μονοδιάστατα προβλήματα. Τα προβλήματα αυτά μπορεί να θεωρηθούν πολύ απλά για να έχουν πρακτική αξία, αλλά ο πειραματισμός μαζί τους ανέδειξε διάφορες πλευρές της φύσης των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή. Τα ποιοτικά τους χαρακτηριστικά φαίνονται στον πίνακα 1. Η ταχύτητα σύγκλισης, όπως φαίνεται μπορεί να είναι χαμηλή, μέση ή υψηλή. Οι επαναλήψεις μπορούν να προσεγγίσουν την πραγματική λύση μονότονα ή όχι και μπορεί να υπάρχουν μία, δύο ή καμία παράμετροι χαλάρωσης για να επιταχύνουν τη σύγκλιση. Κάποιες μέθοδοι είναι ενός βήματος, άλλες όχι και κάποιες χρησιμοποιούν ιστορία (η καινούργια τιμή στη διεπαφή ισούται με την παλιά συν έναν όρο διόρθωσης), ενώ άλλες όχι.

	Ταχύτητα	Μονοτονικότητα Σύγκλισης	Αριθμός Παραμέτρων	Διαθέσιμη Θεωρία	Μνήμη	Ενός Βήματος
AVE	Μέση	Όχι	2	Λίγη	Όχι	Όχι



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



GEO	Μέση	Ναι	2	Λίγη	Ναι	Ναι
NEW	Μέση	Όχι	Καμία	Όχι	Ναι	Ναι
ROB	Χαμηλή	Όχι	1	Λίγη	Όχι	Ναι
SCO	Μέση	Όχι	1	Λίγη	Ναι	Όχι
SHO	Μέση	Ναι	Καμία	Λίγη	Ναι	Ναι
SPO	Υψηλή	Ναι	1	Όχι	Ναι	Όχι

Πίνακας 3: Ιδιότητες των επτά μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή

Τα βασικά συμπεράσματα που προκύπτουν από αυτή τη συγκριτική ανάλυση είναι ότι υπάρχουν αρκετές μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή που δείχνουν ότι έχουν τις δυνατότητες να δουλέψουν αποδοτικά και ότι μένουν ακόμα πολλά να μάθουμε για τη συμπεριφορά τους και για το πώς να διαλέγουμε ανάμεσά τους την κατάλληλη, αλλά και το πώς να διαλέγουμε τις παραμέτρους τους.

Στην παρούσα μελέτη η μέθοδος που θα υλοποιήσουμε είναι η GEO γιατί είναι μία από αυτές που έχουν πολύ καλά χαρακτηριστικά, όπως μονοτονικότητα στη σύγκλιση, χρήση ιστορίας (η καινούργια τιμή στη διεπαφή ισούται με την παλιά συν έναν όρο διόρθωσης) και το ότι είναι ενός βήματος. Επίσης γιατί για τη GEO υπάρχει μια πρόσφατη υλοποίηση [22] με την οποία μπορούμε να συγκρίνουμε την προτεινόμενη υλοποίηση. Η υλοποίηση βέβαια και των υπόλοιπων έξι μεθόδων στο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων/ πολλαπλών φυσικών που υλοποιούμε είναι στα άμεσα μελλοντικά μας σχέδια.

3.2. Πειραματικά αποτελέσματα σε Clusters πάνω από Cloud

Έχουμε εκτελέσει έναν εκτενή αριθμό πειραμάτων σε μία συστάδα 8 εικονικών μηχανημάτων που υλοποιείται σε μια υποδομή υπολογιστικού νέφους με χρήση OpenStack στο υπολογιστικό κέντρο του Τμήματος Μηχανικών Πληροφορικής και Υπολογιστών του ΤΕΙ Δυτικής Ελλάδας. Η υποδομή νέφους χρησιμοποιεί ένα Dell Blade Enclosure με 16 dual processor Xeon servers, με κάθε επεξεργαστή να έχει 6 hyper-threading πυρήνες και 48 Gbytes κύριας μνήμης. Τα blades είναι διασυνδεδεμένα με 1 GBit Ethernet. Κάθε εικονικό μηχάνημα έχει 4 εικονικές CPUs και 8 GBytes RAM.

Για όλα τα προβλήματα έχουμε δημιουργήσει όλους τους πιθανούς συνδυασμούς εκτέλεσης για το μέγιστο αριθμό νημάτων $nt=\{1, 2, 4, 6, 8\}$ ανά διεργασία $np=\{1, 2, 4, 8, 16, 32, 64\}$ και τον αριθμό των τυχαίων περιπάτων που πραγματοποιούνται ανά κόμβο από τον αλγόριθμο Monte Carlo $walks = \{20K, 40K, 80K, 160K\}$, ώστε να μπορέσουμε να καθορίσουμε την επιτάχυνση και την κλιμάκωση της προτεινόμενης προσέγγισης. Για το profiling της υβριδικής υλοποίησης έχουμε χρησιμοποιήσει τον mpiP profiler [43] που είναι μια ελαφριά βιβλιοθήκη profiling για MPI εφαρμογές. Επειδή απλά συλλέγει στατιστική πληροφορία για τις MPI συναρτήσεις, το mpiP δημιουργεί σημαντικά λιγότερη επιβάρυνση και πολύ λιγότερα δεδομένα σε σχέση με άλλες βιβλιοθήκες ιχνηλάτησης του χρόνου εκτέλεσης.

Οι Πίνακες 3-10 παρουσιάζουν μέρος από τους χρόνους εκτέλεσης σε δευτερόλεπτα από το σύνολο των πραγματοποιηθέντων πειραμάτων και ο Πίνακας 11



την επιτάχυνση που επιτεύχθηκε για όλα τα προβλήματα εισόδου σε σχέση με τους χρόνους εκτέλεσης με χρήση ενός νήματος και μίας διεργασίας. Για κάθε συνδυασμό παραμέτρων ο παράλληλος αλγόριθμος εκτελέστηκε 10 φορές στο περιβάλλον της υποδομής νέφους.

Πρόβλημα	1						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	26	8	6	3	3	4	3
80K	49	14	11	5	4	6	5
160K	98	24	19	9	6	6	8

Πίνακας 4: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 1

Πρόβλημα	2						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	26	9	7	4	3	3	4
80K	50	14	10	6	4		5
160K	99	25	19	9	6	7	9

Πίνακας 5: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 2

Πρόβλημα	3						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	25	10	5	3	3	2	3
80K	40	26	10	4	3	4	4
160K	99	38	18	8	5	6	6

Πίνακας 6: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 3

Πρόβλημα	4						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	538	183	120	70	62	68	77
80K	931	298	170	88	80	86	90
160K	1777	511	295	124	109	122	129

Πίνακας 7: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 4

Πρόβλημα	5						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	534	183	120	70	62	68	74
80K	946	298	170	88	180	86	90
160K	1757	511	295	124	109	122	129

Πίνακας 8: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 5



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Πρόβλημα	6						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	94	176	423	78	72	75	77
80K	847	273	164	97	82	92	94
160K	1550	464	292	135	106	121	130

Πίνακας 9: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 6

Πρόβλημα	7						
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	365	176	109	78	72	75	77
80K	713	273	164	97	82	92	94
160K	1416	464	292	135	105	121	130

Πίνακας 10: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 7

Προβλήματα εισόδου							
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	2008	745	610	306	277	295	312
80K	3576	1196	699	385	335	371	382
160K	6796	2037	1230	544	446	505	541

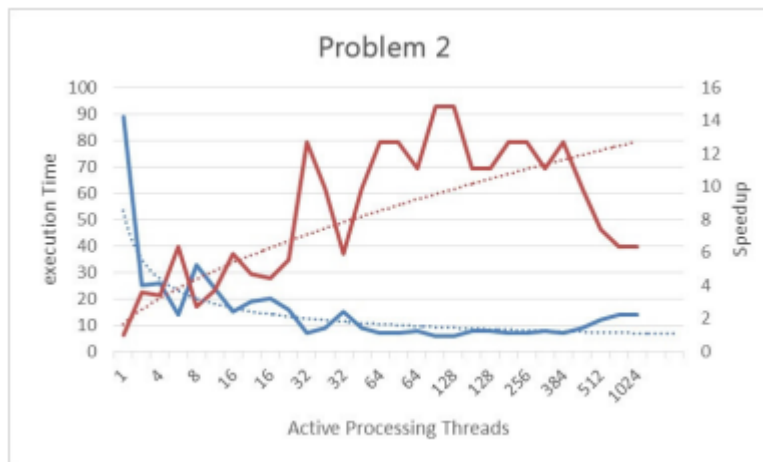
Πίνακας 11: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – άθροισμα

Επιτάχυνση προβλημάτων εισόδου						
Np	2	4	8	16	32	64
Nt	2	4	6	6	8	8
Min	2.81	2.03	6.33	6.86	6.59	6.42
Avg	3.08	4.17	8.85	10.60	9.53	9.12
Max	3.34	5.13	11.48	14.62	12.81	11.92

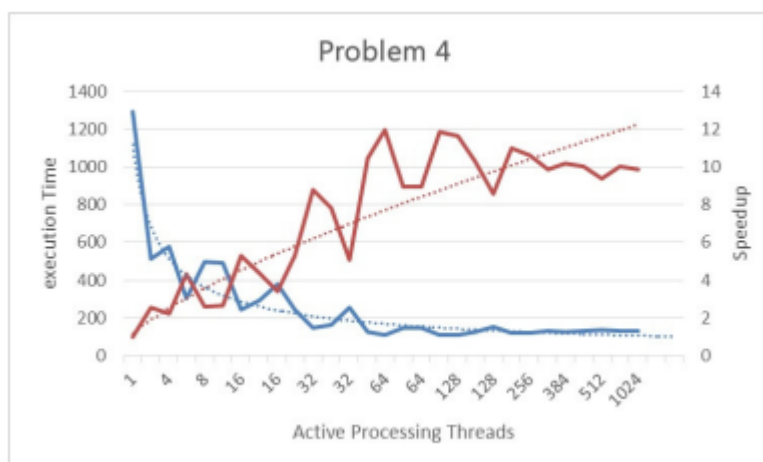
Πίνακας 12: Επιτάχυνση

Η λεπτομερής ανάλυση των εκτελέσεων δείχνει ότι ο αλγόριθμος κλιμακώνεται σχεδόν γραμμικά σε σχέση με τον αριθμό των ενεργών νημάτων επεξεργασίας, δηλαδή τον αριθμό των διεργασιών πολλαπλασιασμένο με τον αριθμό των νημάτων, έως ότου ο χρόνος εκτέλεσης του Monte Carlo μειωθεί σημαντικά λόγω της παραλληλοποίησης και οι χρόνοι εκτέλεσης των άλλων δύο κόμβων κυριαρχούν στο συνολικό χρόνο εκτέλεσης.

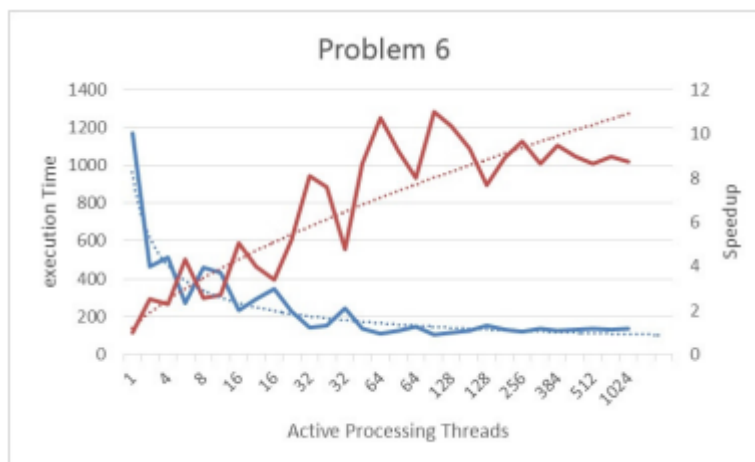
Οι Εικόνες 1-4 παρουσιάζουν την επιτάχυνση και τον συνολικό χρόνο εκτέλεσης για κάποια από τα προβλήματα εισόδου.



Εικόνα 3: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 2



Εικόνα 4: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 4



Εικόνα 5: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 6



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

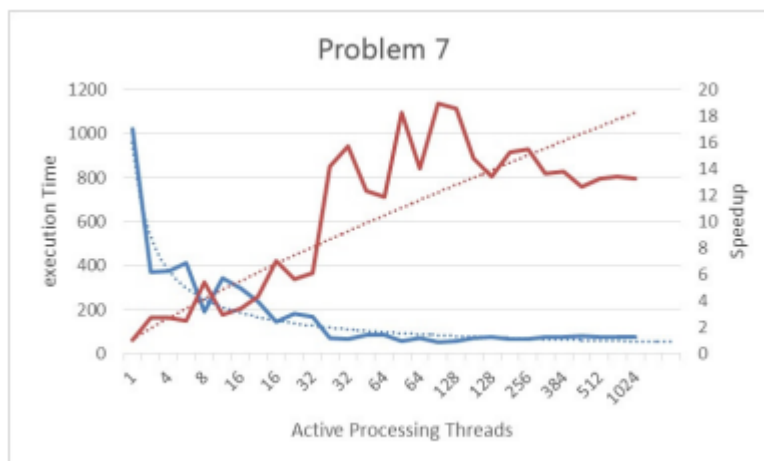


ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



Εικόνα 6: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 7

3.3. Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού

Σε αυτό το διάστημα στα πλαίσια της δράσης 4.1 ολοκληρώθηκε η υλοποίηση της μεθόδου interface relaxation στην πλατφόρμα FEniCS με τρόπο που να υποστηρίζεται η επίλυση προβλημάτων με περισσότερα από 2 και πιο πολύπλοκα πεδία. Για τα πεδία υπάρχει η δυνατότητα να εισάγονται και γραφικά και σε script και αναπτύχθηκαν κατάλληλες συναρτήσεις που θα επιτρέπουν την κλήση της μεθόδου interface relaxation με τις κατάλληλες παραμέτρους.

4. Παραδοτέα

Η παρούσα Ετήσια Έκθεση Προόδου του φυσικού αντικειμένου.

5. Συνεργασίες

Κατά τη διάρκεια αυτής της περιόδου, υπήρξε συνεργασία με την ΚΕΟ2, σχετικά με την παράλληλη υλοποίηση των μεθόδων Χαλάρωσης στη Διεπαφή και της μεθόδου υβριδικού επιλυτή διαφορικών εξισώσεων με χρήση Monte Carlo.

6. Μελλοντικές Δράσεις

Η ΚΕΟ3, στο επόμενο διάστημα θα ασχοληθεί με την παράλληλη υλοποίηση των μεθόδων Interface Relaxation σε clusters και την αξιολόγηση της απόδοσης των παράλληλων υλοποιήσεων της παραπάνω μεθόδου. Σε σχέση με την υλοποίηση του υβριδικού επιλυτή διαφορικών εξισώσεων με χρήση Monte Carlo, τα μελλοντικά μας σχέδια περιλαμβάνουν την παραλληλοποίηση του επιλυτή Laplace σε μηχανήματα

κατανομημένης μνήμης και την ενσωμάτωση του υβριδικού αλγορίθμου στην πλατφόρμα FEniCS.

7. Βιβλιογραφία

- [1] D. Keyes and W. Gropp. A comparison of domain decomposition techniques for elliptic partial differential equations and their parallel implementation. SIAM J. Sci. Stat. Comput., 8:s166-s202, 1987.
- [2] Tony F. Chan and Tarek P. Mathew. Domain decomposition algorithms. In Acta Numerica 1994, pages 61-43. Cambridge University Press, 1994.
- [3] T. F. Chan and D. C. Reasco. A survey of preconditioners for domain decomposition. Technical Report /DCS/RR-414, Yale University, 1985.
- [4] P.E. Bjorstad, O. Widlund. To overlap or not overlap: A note on a domain decomposition method for elliptic problems, SIAM J. Sci. Statist Comput. 10 (2) (1989) 1053–1061.
- [5] T.F. Chan, D. Goovaerts. On the relationship between overlapping and nonoverlapping domain decomposition methods, SIAM J. Matrix Anal. Appl. 13 (1992) 663–670.
- [6] T. F. Chan, T. Y. Hou, and P. L. Lions. Geometry related convergence results for domain decomposition algorithms. SIAM J. Numer. Anal., 28(2):378-391, 1991.
- [7] J.R. Rice, An agent-based architecture for solving partial differential equations, SIAM News 31 (6) (1998).
- [8] A. Bamberger, R. Glowinski, and Q. H. Tran. A domain decomposition method for the acoustic wave equation with discontinuous coefficients and grid change. SIAM J. Numer. Anal., 34(2):603-639, 1997.
- [9] B. Despres. Domain decomposition method and the Helmholtz problem. In L. Halpern, G. Cohen and P. Joly, editors, Mathematical and Numerical Aspects of Wave Propagation Phenomena, pages 44-52. SIAM, 1991.
- [10] S. Kim. A parallelizable iterative procedure for the Helmholtz problem. Appl. Numer. Math., 17:411-425, 1995.
- [11] J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, E. Vavalis, and D. Yang. Domain decomposition methods for underwater acoustics problems. Technical report, Computer Science Department, Purdue University, W. Lafayette.
- [12] D. Yang. A non-overlapping domain decomposition method for elliptic interface problems. Technical Report # 1472, University of Minnesota, 1997.
- [13] Drashansky T.: An Agent-Based Approach to Building Multidisciplinary Problem Solving Environments. PhD Thesis, Purdue University, Computer Science Department, (1996).
- [14] J. Xu and J. Zou. Non-overlapping domain decomposition methods. Technical report, Mathematics Department, Pennsylvania State University, University Park, PA, 1996.
- [15] M. Mu, Solving composite problems with interface relaxation, SIAM Journal on Scientific Computing 20 (1999) pp. 1394-1416.

- [16] D. Funaro, A. Quarteroni, P. Zanolli, An iterative procedure with interface relaxation for domain decomposition methods, SIAM J. Numer. Anal. 25 (6) (1988) 1213–1236.
- [17] D. Yang, A parallel iterative nonoverlapping domain decomposition procedure for elliptic problems, IMA J. Numer. Anal. 16 (1996) 75–91.
- [18] M. Mu, J.R. Rice, Modeling with collaborating PDE solvers-theory and practice, Computing Systems in Engineering 6 (1995) pp. 87-95.
- [19] A. Hadjidimos, Y.G. Saridakis, “Modified Successive Overrelaxation (MSOR) and Equivalent 2-step Iterative Methods for Collocation Matrices”, J. of Computational & Applied Math 42, pp 375-393, 1992.
- [20] D. Yang, A parallel domain decomposition algorithm for elliptic problems. J. Comp. Math., 16:141-151, 1998.
- [21] J.R. Rice, E. Vavalis, and D. Yang. Analysis of a non-overlapping domain decomposition method for elliptic PDEs. J. Comput. Appl. Math., 87:11-19, 1997.
- [22] Tsompanopoulou, P., Vavalis, E.: Analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations. Journal of Computational and Applied Mathematics 226 2, 370–387 (2009).
- [23] P.L. Lions, On the Schwarz alternating method III: A variant for nonoverlapping subdomains, in: R. Glowinski, G.H. Golub, G.A. Meurant and J. Periaux (Eds.), Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, SIAM, Philadelphia, PA, 1990, pp. 202–223.
- [24] J. Douglas Jr., P. J. Paes Leme, J. E. Roberts, and J. Wang. A parallel iterative procedure applicable to the approximate solution of the second order partial differential equations by mixed finite element methods. Numer. Math., 65:95-108, 1993.
- [25] J. Douglas Jr. and C-S Huang. An accelerated domain decomposition procedure based on Robin transmission conditions. Technical report, Purdue University, Department of Mathematics, 1996.
- [26] Q. Deng. An analysis for a nonoverlapping domain decomposition iterative procedure. SIAM J. Sci. Comput., 18:1517-1525, 1997.
- [27] H. T. M. van der Maarel and A. Platschorre. Optimization of flexible computing in domain decomposition for a system of PDEs. In Proc. of the Ninth Int. Conf. on Domain Decomposition Methods. 1998.
- [28] W. Heinrichs, Domain decomposition for fourth-order problems, SIAM J. Numer. Anal. 30 (2) (1993) 435–453.
- [29] C.H. Lai, On domain decomposition and shooting methods for two-point boundary value problem, in: D.E. Keyes and J. Xu (Eds.), Seventh International Conference of Domain Decomposition Methods in Scientific and Engineering Computing, Contemporary Mathematics, AMS, Vol. 180, 1994, pp. 257–264.
- [30] P. Le-Tallec, Y. De-Roecl, M. Vidrascu, Domain decomposition methods for large linearly elliptic 3-dimensional problems, J. Comput. Appl. Math. 34 (1) (1991) 93–117.
- [31] Rice, J. R., Tsompanopoulou, P., Vavalis, E.: Interface relaxation methods for elliptic differential equations. Applied Numerical Mathematics 32 2, 219–245 (2000).

- [32] Logg, A., Mardal, K. A., Wells, G. N. et al.: Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Springer, (2012).
- [33] Rabbitmq, 2014. Online. Available: www.rabbitmq.com/documentation.html (accessed July 11, 2014).
- [34] K. P. Esler, Jeongnim Kim, L. Shulenburger, and D.M. Ceperley “Fully accelerating quantum Monte Carlo simulations of real materials on GPU clusters”.
- [35] John Strikwerda, “Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations”, SIAM, 2nd edition, 2004.
- [36] Norma Alias, “Some Parallel Numerical Methods in Solving Partial Differential Equations”, submitted 2nd International Conference on Computer Engineering and Technology, 2010.
- [37] G. Sarailidis and M. Vavalis, “Hybrid Solvers for Elliptic PDEs on rectangular multi-domains in 2 and 3 dimensions”, submitted to Scientific Computing, 2013.
- [38] J.M Delaurentis, L.A Romero, ”A Monte Carlo method for poisson’s equation”, Journal of Computational Physics, Volume 90, Issue 1”, September 1990, Pages 123-140, ISSN 0021-9991, [http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(90\)90199-B](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(90)90199-B).
- [39] Edgar Gabriel et al. “Open MPI: Goals, Concept, and Design of a Next Generation MPI Implementation”, In Proceedings, 11th European PVM/MPI Users’ Group Meeting, Budapest, Hungary, September 2004.
- [40] SPLINE, a C++ library which constructs and evaluates spline functions. http://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/cpp_src/spline/spline.html
- [41] MBA - Multilevel B-Spline Approximation Library: <http://www.sintef.no/Projectweb/Geometry-Toolkits/MBA/>
- [42] deal.II - an open source finite element library <http://www.dealii.org/>
- [43] mpiP Profiler - a lightweight profiling library for MPI applications. <http://mpip.sourceforge.net/>
- [44] Fenics - The FEniCS Project is a collection of free software with an extensive list of features for automated, efficient solution of differential equations. <http://fenicsproject.org/>