

# 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 4.1

Συγκερασμός αριθμητικών μεθόδων και λογισμικού



## Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Σκοπός</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Μεθοδολογία</b>	<b>4</b>
2.1	Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ)	4
2.1.1	Η βιβλιοθήκη Dolphin . . . . .	6
2.1.2	Πεπερασμένα Στοιχεία και Πλέγματα . . . . .	6
2.1.3	Η Unified Form Language (UFL) . . . . .	7
2.1.4	Αξιοποίηση Λογισμικού Αιχμής στο Επίπεδο της Γραμμικής Άλγεβρας . . . . .	8
2.2	Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων (Ετερογενών, Υποδομής Cloud και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης) . . . . .	9
2.2.1	Αξιοποίηση Ετερογενών Συστημάτων και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Πειραματικά Αποτελέσματα</b>	<b>11</b>
3.1	Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων (Ετερογενών, Υποδομής Cloud και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης) . . . . .	11
3.1.1	Εγκατάσταση FEniCS σε Cluster & Cloud . . . . .	11
<b>4</b>	<b>Παραδοτέα</b>	<b>11</b>
<b>5</b>	<b>Συνεργασίες</b>	<b>12</b>
<b>6</b>	<b>Μελλοντικές Δράσεις</b>	<b>12</b>

## 1 Σκοπός

Τα τελευταία χρόνια αποτελεί κοινή διαπίστωση των εμπλεκομένων με την σχεδίαση και ανάπτυξη λογισμικού για ευρείας κλίμακας επιστημονικούς υπολογισμούς η αναγκαιότητα για την ανάπτυξη:

- Ενός λειτουργικού περιβάλλοντος επίλυσης προβλημάτων (Problem Solving Environment - PSE) το οποίο, εστιαζόμενο στα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της κλάσης των υπό μελέτη προβλημάτων, διευκολύνει την αποδοτική χρήση (και επανάχρηση) των λογισμικών μονάδων που είτε προϋπάρχουν είτε αναπτύσσονται.
- Μιας καινοτόμου πρακτικής ανάπτυξης λογισμικού η οποία θα μας επιτρέψει να εκμεταλλευτούμε τις δυνατότητες των σύγχρονων υπολογιστικών μηχανών.

Η διαπίστωση της αναγκαιότητας αυτής, η οποία αποκτά ιδιαίτερη σημασία για σύνθετα προβλήματα όπως αυτά με τα οποία ασχολείται το MATENVMED, αποτέλεσε την κινητήρια δύναμη για αρκετές προηγούμενες ερευνητικές προσπάθειες (όπως για παράδειγμα οι [5, 7, 9, 12, 14, 8]). Όμως, ελάχιστες από τις προσπάθειες αυτές πρότειναν λύσεις και πρακτικές με τον απαραίτητο βαθμό καινοτομίας για να ανταποκριθούν στις απαιτήσεις των προβλημάτων μας.

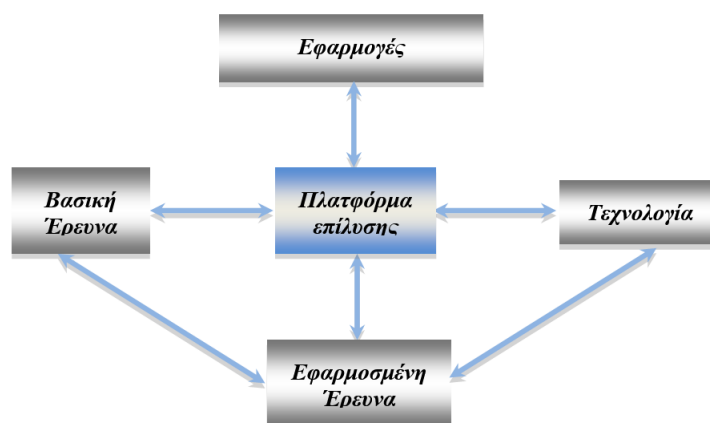
Τα σύγχρονα PSEs αποτελούνται από πολλές και διαφορετικές υπομονάδες λογισμικού (modules). Ο ορισμός, η συσχέτιση και επικοινωνία μεταξύ τους πραγματοποιούνται σε υψηλό επίπεδο. Τα σύγχρονα PSEs οφείλουν να στοχεύουν στην αποδοτική τους εκτέλεση, με όσο το δυνατό περισσότερο διάφανο στον τελικό χρήστη τρόπο, σε συστήματα τελευταίας τεχνολογίας (για παράδειγμα ετερογενή συστήματα με GPUs και FPGAs), όπως επίσης και Clusters ή ακόμα και στο Cloud. Επίσης οφείλουν να εκμεταλλεύονται οποιαδήποτε επιπλέον δυνατότητα παρέχεται από το υλικό, όπως για παράδειγμα γρήγορα μέσα μόνιμης αποθήκευσης (flash storage).

Η παρούσα δράση σχεδιάζει με σαφήνεια μια αρχιτεκτονική αναφοράς, η οποία φιλοδοξεί να θέσει τις βάσεις για μια ενοποιημένη προσέγγιση αντιμετώπισης των σύνθετων προβλημάτων που απασχολούν το έργο MATENVMED, καλύπτοντας τις δύο προαναφερθείσες αναγκαιότητες.

Οι σημαντικότεροι στόχοι της παρούσας δράσης για το έτος 2013 είναι οι ακόλουθοι:

- Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ).
- Επέκταση του ΠΕΠ για την αξιοποίηση σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και πιο συγκεκριμένα ετερογενών συστημάτων, αλλά και σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage).





Εικόνα 1: Συνολική αρχιτεκτονική MATENVMED

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 πειραματικά αποτελέσματα. Στην παράγραφο 4 αναφερόμαστε στα παραδοτέα που παρήχθησαν στα πλαίσια της δράσης. Στην παράγραφο 5 περιγράφουμε τις συνεργασίες που αναπτύχθηκαν, ενώ η παράγραφος 6 ολοκληρώνει την έκθεση με τη συζήτηση πιθανών επεκτάσεων της υποδομής που παράχθηκε στα πλαίσια της δράσης.

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ)

Βασική επιλογή της ομάδας του έργου αποτέλεσε η απόφαση να εξαντληθεί κάθε περιθώριο αξιολόγησης και αξιοποίησης υπαρχόντων περιβαλλόντων επίλυσης προβλημάτων (ΠΕΠ). Με τον τρόπο αυτό, θα ήταν εφικτό να επικεντρωθεί η προσπάθεια της ομάδας στο ερευνητικό αντικείμενο του έργου, δηλαδή την υποστήριξη εφαρμογών MDMP (Multi-Domain, Multi-Physics), έναντι της εξαρχής υλοποίησης ενός νέου ΠΕΠ. Βασικά κριτήρια κατά τη φάση αξιολόγησης των υπαρχόντων ΠΕΠ ήταν τα ακόλουθα:

- Υποστήριξη επίλυσης διαφορικών εξισώσεων.
- Ανοιχτού κώδικα, ώστε να είναι δυνατή η ανάπτυξη της απαιτούμενης υποστήριξης για τις εφαρμογές και τις πλατφόρμες ενδιαφέροντος του έργου. Με άδεια χρήσης που δε θα απαγορεύει τις απαιτούμενες από το έργο δραστηριότητες.

- Ευρεία και ενεργή κοινότητα ανάπτυξης και υποστήριξης.
- Δυνατότητα χρήσης τεχνολογίας (βιβλιοθηκών) αιχμής στο επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας.
- Απλή διεπαφή χρήστη.
- Δυνατότητα χρήσης ως ανεξάρτητο τμήμα λογισμικού στα πλαίσια μεγαλύτερων εφαρμογών.

Το πακέτο FEniCS [10] βρέθηκε να ικανοποιεί κατά τον καλύτερο τρόπο όλα τα παραπάνω κριτήρια. Αποτελεί συλλογή ελεύθερων εργαλείων λογισμικού εξειδικευμένων στην αυτόματη και αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Η παράγραφος αυτή προσφέρει μια σύντομη επισκόπηση των τμημάτων του FEniCS που έχουν ενδιαφέρον στα πλαίσια του έργου. Λεπτομερέστερη περιγραφή μπορεί να βρεθεί στο βιβλίο του FEniCS [10] το οποίο είναι διαθέσιμο ελεύθερα στο βασικό ιστότοπο<sup>1</sup> του FEniCS.

Τα σημαντικότερα χαρακτηριστικά του FEniCS, τα οποία αυτοματοποιούν τις φάσεις δημιουργίας και επίλυσης των συστημάτων που απαιτούνται για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων, είναι τα ακόλουθα:

**Dolfin [11]:** Η βασική διεπαφή χρήστη. Αποκρύπτει τις λεπτομέρειες υλοποίησης των επιμέρους στοιχείων του FEniCS και προσφέρει ένα πλήρες API στον χρήστη, επιτρέποντάς του να αξιοποιήσει όλες τις υπηρεσίες της πλατφόρμας.

**UFL [3]:** Η Unified Form Language είναι η σημειογραφία έκφρασης των PDEs που προσφέρει η διεπαφή χρήστη. Η σημειογραφία αυτή βρίσκεται πολύ κοντά στη μαθηματική σημειογραφία (περισσότερες λεπτομέρειες για τη UFL θα συζητηθούν στην παράγραφο 2.1.3).

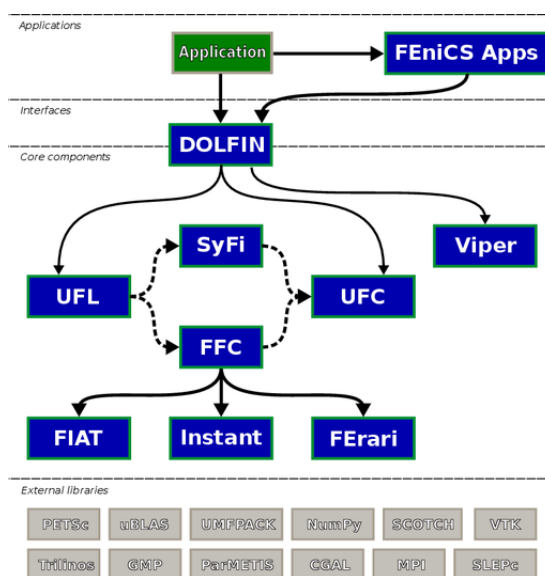
**Πλήθος χώρων πεπερασμένων στοιχείων** ώστε ο χρήστης να επιλέξει το κατάλληλο για το εκάστοτε πρόβλημα, τόσο για 2D, όσο και για 3D χωρία.

**Πλήθος πακέτων γραμμικής άλγεβρας** που υποστηρίζουν διαφορετικές οικογένειες επιλυτών. Τα περισσότερα είναι παραμετροποιήσιμα από το χρήστη.

Επιπλέον, το FEniCS αποτελεί ένα πλήρες και καλά ελεγμένο (τόσο ατομικά όσο και σε επίπεδο διαλειτουργικότητας) σύνολο εργαλείων που διευκολύνει την ανάπτυξη νέων μεθόδων. Η Εικόνα 2 απεικονίζει τη δομή του FEniCS. Η ανάπτυξη στα πλαίσια του MATENVMED επικεντρώνεται κυρίως στη διεπαφή Dolfin του FEniCS και την ικανότητα υποστήριξης νέων βιβλιοθηκών στα κατώτερα επίπεδα με διάφανο τρόπο.

<sup>1</sup><http://fenicsproject.org/book/index.html#book>





Εικόνα 2: Η δομή του FEniCS [10, σελ. 172]

### 2.1.1 Η βιβλιοθήκη Dolfin

Το Dolfin [11] είναι βιβλιοθήκη C++/Python που λειτουργεί ως η βασική διεπαφή χρήστη του FEniCS. Υλοποιεί μεγάλο μέρος της λειτουργικότητας του FEniCS, συμπεριλαμβανομένων δομών δεδομένων και αλγορίθμων για την παραγωγή πλεγμάτων (meshes) και τη συγκρότηση συστημάτων πεπερασμένων στοιχείων. Τελικά παρέχει ένα ΠΕΠ για μοντέλα βασισμένα σε PDEs. Προκειμένου να παρέχει μια απλή και συνεπή διεπαφή χρήστη, το Dolfin λειτουργεί ως περιτύλιγμα (wrapper) της λειτουργικότητας άλλων τμημάτων του FEniCS καθώς και εξωτερικού λογισμικού και είναι υπεύθυνο για τη σωστή επικοινωνία μεταξύ τους.

### 2.1.2 Πεπερασμένα Στοιχεία και Πλέγματα

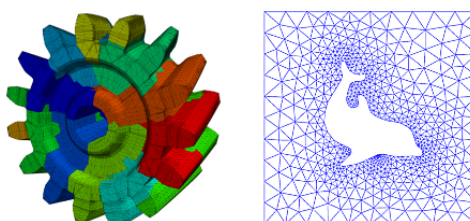
Το FEniCS προσφέρει εκτεταμένη βιβλιοθήκη πεπερασμένων στοιχείων, τα οποία απαριθμούνται στον Πίνακα 1.

Επιπλέον παρέχει πλήρως κατανοητά πλέγματα σε 1 (διαστήματα), 2 (τρίγωνα) και 3 (τετράεδρα) διαστάσεις. Τα πλέγματα είναι δυνατό να γίνονται λεπτομερέστερα με προσαρμοστικό τρόπο. Επιπλέον, προσφέρεται υποστήριξη για παράλληλο υπολογισμό μέσω διαίρεσης του πλέγματος σε υποπλέγματα. Ένα παράδειγμα φαίνεται στην Εικόνα 3.



Όνομα	Σύμβολο
Bubble	B
Crouzeix–Raviart	CR
Discontinuous Lagrange	DG
Discontinuous Raviart-Thomas	DRT
Lagrange	CG
Nedelec 1st kind H(curl)	N1curl
Nedelec 2nd kind H(curl)	N2curl
Quadrature	Q
Raviart–Thomas	RT
Real	R

Πίνακας 1: Πεπερασμένα στοιχεία που υποστηρίζονται στο Dolfin 1.4.



Εικόνα 3: Πλέγματα 3D & 2D [10, σελ. 214, 205]

### 2.1.3 Η Unified Form Language (UFL)

Η UFL [3] είναι ένα από τα κεντρικά συστατικά στοιχεία του FEniCS. Πρόκειται για γλώσσα πεδίου για την έκφραση διακριτοποιήσεων πεπερασμένων στοιχείων, την έκφραση μη γραμμικών PDEs και την αυτόματη διαφορίση εκφράσεων και φορμών. Πιο συγκεκριμένα, η γλώσσα ορίζει μια ευέλικτη διεπαφή χρήστη για τη μοντελοποίηση χώρων πεπερασμένων στοιχείων και την έκφραση ασθενών διατυπώσεων (weak formulations) σε σημειογραφία που προσεγγίζει τη μαθηματική. Μπορεί να χειριστεί περίπλοκα προβλήματα με εύκολο, κομψό και αποδοτικό τρόπο.

Οι ασθενείς διατυπώσεις αποτελούν σημαντικό εργαλείο για την ανάλυση εξισώσεων. Επιτρέπουν τη μεταφορά αρχών και μεθόδων γραμμικής άλγεβρας στην επίλυση προβλημάτων σε άλλα πεδία, όπως στις μερικές διαφορικές εξισώσεις. Σε μία ασθενή διατύπωση η εξίσωση δεν απαιτείται πλέον να ικανοποιείται σε κάθε σημείο, αλλά αντίθετα έχει ασθενείς λύσεις ως προς διανύσματα ή συναρτήσεις ελέγχου [13, p. 24]. Αυτή η προσέγγιση είναι, για παράδειγμα, ισοδύναμη με τη διατύπωση ενός προβλήματος ώστε να απαιτεί λύση στη μορφή μιας κατανομής.





Η φιλική προς το χρήστη σημειογραφία και η υποστήριξη για ταχεία ανάπτυξη αποτελούν κεντρικές αξίες της σχεδίασης της UFL. Η χρήση σημειογραφίας κοντά στη μαθηματική επιτρέπει την εύκολη έκφραση ιδεών, μειώνοντας σημαντικά την πιθανότητα εισαγωγής σφαλμάτων στον κώδικα.

Παρακάτω ακολουθεί παράδειγμα έκφρασης της εξίσωσης Poisson σε UFL [10, p. 3]:

$$\underbrace{\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx}_{a(u,v)} = \underbrace{\int_{\Omega} f v \, dx}_{L(v)} \quad \forall v \in V.$$

Ο Κώδικας 1 αντιστοιχεί στην έκφραση της εξίσωσης στη σημειογραφία του FEniCS:

Κώδικας 1: Ορισμός PDE σε σημειογραφία FEniCS UFL

```
1 u = TrialFunction(V)
2 v = TestFunction(V)
3
4 a = dot(grad(u), grad(v))*dx
5 L = f*v*dx
```

Ο Κώδικας 2 αντιστοιχεί στις εντολές που απαιτούνται για την επίλυση του προβλήματος:

Κώδικας 2: Επίλυση PDE σε FEniCS UFL

```
1 u = Function(V)
2 solve(a == L, u, bc)
```

#### 2.1.4 Αξιοποίηση Λογισμικού Αιχμής στο Επίπεδο της Γραμμικής Άλγεβρας

Το FEniCS ενσωματώνει και παρέχει ενιαίο τρόπο αξιοποίησης πλήθους βιβλιοθηκών γραμμικής άλγεβρας υψηλής επίδοσης, μέσω ενός κοινού για όλες περιτυλίγματος (wrapper). Ενσωματώνεται υποστήριξη για τις βιβλιοθήκες PETSc [4], Trilinos/Epetra [6], uBLAS [1] και MTL4 [2]. Ορισμένες από τις βιβλιοθήκες μπορούν εγγενώς να εκμεταλλευτούν παράλληλα συστήματα (PETSc, Epetra).

Ο χρήστης μπορεί εύκολα να εναλλαχθεί μεταξύ βιβλιοθηκών γραμμικής άλγεβρας στο χαμηλότερο επίπεδο, αλλάζοντας απλά την τιμή μιας παραμέτρου στον κώδικά του στο επίπεδο του Dolfin.





## 2.2 Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων (Ετερογενών, Υποδομής Cloud και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης)

### 2.2.1 Αξιοποίηση Ετερογενών Συστημάτων και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης

Στόχος του έργου MATENVMED είναι η επέκταση του FEniCS για την αξιοποίηση επιλυτών υλοποιημένων σε επιταχυντές, επιλυτών που εκμεταλλεύονται μέσα αποθήκευσης flash, καθώς και για την υποστήριξη επιλυτών εξειδικευμένων σε συγκεκριμένες κατηγορίες προβλημάτων. Επίσης, θα πρέπει να υποστηρίζονται αντίστοιχες υλοποιήσεις των αλγόριθμων χαλάρωσης στις διεπαφές (για προβλήματα MDMP) και μάλιστα με φυσικό – για την κοινότητα χρηστών του FEniCS – τρόπο. Για το σκοπό αυτό, η εσωτερική διεπαφή προγραμματισμού του FEniCS έχει επεκταθεί με γενικό και αφαιρετικό τρόπο ως προς τον τελικό χρήστη.

Συγκεκριμένα, η σχεδίαση ορίζει μία νέα πρότυπη υλοποίηση (whale) της υψηλού επιπέδου διεπαφής γραμμικής άλγεβρας, η οποία έχει τη δυνατότητα να συνδυάζει διαφορετικές υποστηριζόμενες βιβλιοθήκες γραμμικής άλγεβρας (ενδεχομένως με μετατροπή της μορφής δεδομένων από την μία στην άλλη), καθώς επίσης να ενσωματώνει νέους πειραματικούς επιλυτές στο ήδη υπάρχον μαθηματικό περιβάλλον.

Η συγκεκριμένη προσέγγιση προσφέρει λύση στην ανάγκη για επαλήθευση νέων μεθόδων και επιλυτών επάνω σε μια πλήρη, αποδοτική και παραμετροποιήσιμη πλατφόρμα όπως η πλατφόρμα FEniCS. Με αυτόν τον τρόπο μειώνεται ο χρόνος επαλήθευσης μιας νέας μεθόδου, γνωρίζοντας ότι τα υπόλοιπα συστατικά στοιχεία λειτουργούν και έχουν επαληθευθεί ανεξάρτητα. Επίσης η συγκεκριμένη προσέγγιση προσφέρει τη δυνατότητα εκτέλεσης μεθόδων και επιλυτών σε διαφορετικές μονάδες επεξεργασίας και σε επιταχυντές σε ένα ετερογενές σύστημα, εκμεταλλευόμενη το στοιχείο της παράλληλης επεξεργασίας όπου αυτό είναι δυνατόν, μειώνοντας επιπλέον τον χρόνο υπολογισμού για πολύ μεγάλα προβλήματα. Αντίστοιχα, επιτρέπει την εκτέλεση επιλυτών που αξιοποιούν τυχόν υπάρχουσες γρήγορες μονάδες μόνιμης αποθήκευσης.

Η προσθήκη whale, πέραν των πλεονεκτημάτων προς τον τελικό χρήστη, επιτρέπει στον σχεδιαστή επιλυτών να επικεντρωθεί στην εσωτερική βελτίωση της εκάστοτε αναπτυσσόμενης βιβλιοθήκης γραμμικής άλγεβρας και τον ορισμό της διεπαφής με το υπόλοιπο περιβάλλον του FEniCS, δίχως να απαιτείται αλλαγή στα υπόλοιπα λειτουργικά μέρη που το απαρτίζουν.

Η προσθήκη whale αναπτύχθηκε επάνω στον πηγαίο κώδικα της έκδοσης 1.6 του FEniCS. Η ενοποίηση γίνεται εισάγοντας τον κώδικα της προσθήκης με την τεχνική 'μπαλώματος' (patching) στον πηγαίο κώδικα.



Ο χρήστης ελέγχει την ενεργοποίηση και απενεργοποίηση της προσθήκης μέσω των επιλογών ρύθμισης που προσφέρονται. Οι ρυθμίσεις ακολουθούν τη μορφή των υπολοίπων επιμέρους συστατικών του FEniCS και είναι προσβάσιμες από το περιβάλλον Dolphin μέσω της διεπαφής. Η προσθήκη `Whale` μπορεί να χρησιμοποιηθεί και από τις δυο γλώσσες που υποστηρίζονται από το Dolphin, δηλαδή την C++ και την Python.

Οι κλάσεις της διεπαφής γραμμικής άλγεβρας του FEniCS (`GenericVector`, `GenericMatrix`, `GenericLUSolver`, `GenericKrylovSolver`, κα.) έχουν επεκταθεί για να υποστηρίξουν την προσθήκη `Whale`, η οποία υλοποιεί την συγκεκριμένη διεπαφή. Η υλοποίηση όπως είναι αναμενόμενο ακολουθεί το παράδειγμα των ήδη υποστηριζόμενων βιβλιοθηκών γραμμικής άλγεβρας (`PETSc`, `Trilinos` κα.).

Η προσθήκη `Whale` είναι απενεργοποιημένη από προεπιλογή και ο χρήστης πρέπει να την ενεργοποιήσει ρητά μέσω κατάλληλης επιλογής ρύθμισης. Για παράδειγμα, χρησιμοποιώντας τη διεπαφή Python, ο τελικός χρήστης μπορεί εύκολα να ενεργοποιήσει την προσθήκη `Whale` σε οποιοδήποτε υπάρχον αρχείο πηγαίου κώδικα, απλά προσθέτοντας την παρακάτω εντολή ενεργοποίησης (Κώδικας 3):

Κώδικας 3: Επιλογή ρύθμισης για την ενεργοποίηση της προσθήκης `Whale` μέσω της διεπαφής Python.

```
from dolfin import *

parameters["use_whale_backend"] = True

# rest of the code
```

Με την ενεργοποίηση, η προσθήκη χρησιμοποιεί την προσαρμοσμένη βιβλιοθήκη γραμμικής άλγεβρας που έχει ενσωματώσει ο σχεδιαστής, για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από τον ορισμό του προβλήματος. Εάν δεν υπάρχει διαθέσιμη μία τέτοια προσαρμοσμένη βιβλιοθήκη, η προσθήκη χρησιμοποιεί την προεπιλεγμένη βιβλιοθήκη του FEniCS, έτσι ώστε ο τελικός χρήστης να είναι σε θέση να χρησιμοποιήσει το περιβάλλον με τον συνηθισμένο τρόπο, παρακάμπτοντας εξ ολοκλήρου τον μηχανισμό πρόσβασης σε προσαρμοσμένες βιβλιοθήκες γραμμικής άλγεβρας που προσφέρεται.



## 3 Πειραματικά Αποτελέσματα

### 3.1 Επέκταση του ΠΕΠ για την Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων (Ετερογενών, Υποδομής Cloud και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης)

#### 3.1.1 Εγκατάσταση FEniCS σε Cluster & Cloud

Αφού ολοκληρώθηκε η εγκατάσταση της πλατφόρμας FEniCS, έγινε δοκιμαστική λειτουργία και έτρεξαν ενδεικτικά προβλήματα, που έχει έτοιμα η πλατφόρμα, αφενός να γίνει εξοικείωση με τη χρήση της και αφετέρου να εξεταστούν οι δυνατότητες και ελλείψεις της. Πραγματοποιήθηκε η εγκατάσταση εξολοκλήρου της πλατφόρμας σε cluster περιβάλλον (στο Τμήμα Τηλεπικοινωνιακών Συστημάτων και Δικτύων του ΤΕΙ Δ. Ελλάδας), και σε μικρής κλίμακας υποδομή cloud (στο Εργαστήριο Αναγνώρισης Προτύπων του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών).

Το cluster, στο οποίο εγκαταστάθηκε η FEniCS, αποτελείται από 14 blades, από τα οποία χρησιμοποιήθηκαν τα 2. Τα blades μεταξύ τους επικοινωνούν με infiniband δίκτυο. Το κάθε blade έχει 4 πυρήνες (Intel(R) Xeon(R) CPU E5530 @ 2.40GHz), 6GB RAM, και 256GB σκληρό δίσκο. Το λειτουργικό το οποίο τρέχει πάνω στο cluster είναι το SL5 (Scientific Linux 5) το οποίο είναι ουσιαστικά κλώνος του RH6. Η εγκατάσταση έγινε σε VM του Ubuntu Server και από εκεί και πέρα συνεχίστηκε η παραμετροποίηση και εγκατάσταση της FEniCS.

Ακολούθησε η εγκατάσταση της FEniCS στην cloud υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων, του Τμήματος Μηχανικών Ηλεκτρονικών Υπολογιστών και Πληροφορικής του Πανεπιστημίου Πατρών το οποίο αποτελείται από Intel(R) Xeon(R) CPU E3-1220@3.10GHz με 4 cores και 16GB RAM. Το λειτουργικό το οποίο τρέχει στους κόμβους του cloud είναι το Ubuntu Server Edition.

## 4 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της παρούσας δράσης, σύμφωνα και με το τεχνικό δελτίο του έργου, είναι τα ακόλουθα:

**Τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων:** το παρόν κείμενο.

**Πρότυπο λογισμικό για Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων** το οποίο περιλαμβάνει προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη εναλλακτικών αρχιτεκτονικών (επέκταση Whale).



	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Προδιαγραφές ΠΕΠ	x	x	x
Απαιτήσεις για υποστήριξη προβλημάτων MDMP	x	x	x
Υποδομή Υποστήριξης GPUs/FPGAs/Flash Storage		x	

Πίνακας 2: Συνεργασίες στα πλαίσια της Δράσης 4.1.

## 5 Συνεργασίες

Στον Πίνακα 2 συνοψίζονται οι βασικές δραστηριότητες που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της δράσης και αναφέρονται οι ομάδες που συμμετείχαν.

## 6 Μελλοντικές Δράσεις

Στα πλαίσια της παρούσας δράσης επελέχθη καταρχήν το FEniCS ως κατάλληλο περιβάλλον επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Επίσης, αναπτύχθηκε υποδομή ώστε να είναι δυνατή η αξιοποίηση από το FEniCS μοντέρνων αρχιτεκτονικών (GPUs, FPGAs, γρήγορες συσκευές αποθήκευσης).

Βασική επιδίωξη για τον επόμενο χρόνο είναι η ενσωμάτωση στο περιβάλλον του FEniCS της λειτουργικότητας που απαιτείται για την αντιμετώπιση των προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου (MDMP). Επίσης σκοπεύουμε να μελετήσουμε την αλληλεπίδραση των προβλημάτων ενδιαφέροντος με σύγχρονες αρχιτεκτονικές εκτέλεσης και αποθήκευσης.

## Αναφορές

- [1] Boost basic linear algebra library, 2014.
- [2] Overview of mtl4, 2014.
- [3] Martin S. Alnæs. *UFL: a Finite Element Form Language*, chapter 17. Springer, 2012.
- [4] Satish Balay, William D. Gropp, Lois Curfman McInnes, and Barry F. Smith. Efficient management of parallelism in object oriented numerical software libraries. In E. Arge, A. M. Bruaset, and H. P. Langtangen, editors, *Modern Software Tools in Scientific Computing*, pages 163–202. Birkhäuser Press, 1997.



- [5] N Goedel, T Warburton, and M Clemens. Gpu accelerated discontinuous galerkin fem for electromagnetic radio frequency problems. In *2009 IEEE Antennas and Propagation Society International Symposium*, 2009.
- [6] Michael A. Heroux, Roscoe A. Bartlett, Vicki E. Howle, Robert J. Hoekstra, Jonathan J. Hu, Tamara G. Kolda, Richard B. Lehoucq, Kevin R. Long, Roger P. Pawlowski, Eric T. Phipps, Andrew G. Salinger, Heidi K. Thornquist, Ray S. Tuminaro, James M. Willenbring, Alan Williams, and Kendall S. Stanley. An overview of the trilinos project. *ACM Trans. Math. Softw.*, 31(3):397–423, 2005.
- [7] Xin-Ming Huang and Jing Ma. An fpga-based accelerator for multiphysics modeling. In *Proceedings of the International Conference on Engineering of Reconfigurable Systems and Algorithms, ERSA'04, June 21-24, 2004, Las Vegas, Nevada, USA*, pages 209–212, 2004.
- [8] Volodymyr V Kindratenko, Jeremy J Enos, Guochun Shi, Michael T Showerman, Galen W Arnold, John E Stone, James C Phillips, and Wenmei Hwu. Gpu clusters for high-performance computing. In *Cluster Computing and Workshops, 2009. CLUSTER'09. IEEE International Conference on*, pages 1–8. IEEE, 2009.
- [9] Sándor Kocsárdi, Zoltán Nagy, Árpád Csík, and Péter Szolgay. Simulation of 2d inviscid, adiabatic, compressible flows on emulated digital cnn-um. *Int. J. Circuit Theory Appl.*, 37(4):569–585, May 2009.
- [10] Anders Logg, Kent-Andre Mardal, Garth N. Wells, et al. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.
- [11] Anders Logg and Garth N. Wells. Dofin: Automated finite element computing. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 37(2), 2010.
- [12] R. Nunez, J. Gonzalez, and J. Camberos. Large-scale numerical solution of partial differential equations with reconfigurable computing, 2007 2007.
- [13] Richard A Shapiro. *Adaptive finite element solution algorithm for the Euler equations*, volume 32. Vieweg+ Teubner Verlag, 2013.
- [14] Julien C Thibault. *Implementation of a Cartesian grid incompressible Navier-Stokes solver on multi-GPU desktop platforms using CUDA*. PhD thesis, Boise State University, 2009.

