Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

ZH∕Y-Θ 🚬

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 4.2

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής



Περιεχόμενα

1	Σκοπός				
	1.1	dDHC και IMEX RK σχήματα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου	3		
	1.2	Απεικόνιση των dDHC εξισώσεων για γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs	4		
	1.3	Αναγνώριση, Ψηφιοποίηση και Διακριτοποίηση Ετερογενών Πε- ριοχών MRI Απεικόνισης Εγκεφάλου	4		
2	Μεθοδολογία				
	2.1	dDHC και IMEX RK σχήματα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου	4		
	2.2	Απεικόνιση των dDHC εξισώσεων για γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs	7		
	2.3	Αναγνώριση, Ψηφιοποίηση και Διακριτοποίηση Ετερογενών Πε- ριοχών MRI Απεικόνισης Εγκεφάλου	14		
3	Αποτελέσματα				
	3.1	dDHC και IMEX RK σχήματα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όνκων ενκεφάλου	20		
	3.2	Απεικόνιση των dDHC εξισώσεων για γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs	21		
4	Παραδοτέα				
5	Συνεργασίες				
6	Μελλοντικές Δράσεις				



1 Σκοπός

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων) με ένα τόσο σημαντικό πρόβλημα εφαρμογών, αφετέρου δε η μελέτη της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, με χρήση νέων μεθόδων, λογισμικού και σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών.

Την τρέχουσα περίοδο τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα αναφέρονται:

- Στην συνδυασμό αριθμητικών σχημάτων χρονικής διακριτοποίησης τύπου IMEX Runge-Kutta και της ασυνεχούς μεθόδου dDHC (βλ. Τεχνική Έκθεση 2014 Δράσης 2.1) για την επίλυση μη-γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes). Κύριος στόχος η μείωση του υπολογιστικού κόστους χωρίς επίδραση στην ευστάθεια και τάξη σύγκλισης των μεθόδων.
- Στην απεικόνιση των dDHC εξισώσεων που προκύπτουν από γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes) σε παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές που διαθέτουν γραφικούς επιταχυντές τύπου GPU.
- Στην ανάπτυξη αλγορίθμων αναγνώρισης περιοχών λευκής και φαιάς ουσίας του εγκεφάλου από MRI απεικονίσεις. Ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση των περιοχών αυτών του εγκεφάλου καθώς και επιτυχή εισαγωγή του προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS.

1.1 dDHC και IMEX RK σχήματα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου

Με κύριο στόχο την διατήρηση της ευστάθειας και της τάξης σύγκλισης αλλά και της αποδοτικής υλοποίησης της dDHC μεθόδου με ασυνεχή Hermite δικυβικά πολυώνυμα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+2 διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης τύπου stripe (βλ. Τεχνική Έκθεση 2014 Δράσης 2.1), χρησιμοποιήσαμε δευτέρας και τρίτης τάξης Implicit-Explicit (IMEX) Runge Kutta σχήματα. Τα σχήματα αυτά δρουν με διαφορετικό τρόπο στους γραμμικούς και μη-γραμμικούς όρους ενός συστήματος Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ) με σκοπό να διατηρήσουν την ευστάθεια της λύσης αλλά και να αποφύγουν την επίλυση μη-γραμμικών αλγεβρικών συστημάτων που επιβαρύνουν πολύ το υπολογιστικό κόστος της αριθμητικής επίλυσης του συστήματος ΣΔΕ.



1.2 Απεικόνιση των dDHC εξισώσεων για γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs

Με αντικείμενο την αποδοτική απεικόνιση και υλοποίηση της ασυνεχούς dDHC μεθόδου σε σύγχρονες παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές, με γραφικούς επιταχυντές υπολογισμών, στην τρέχουσα περίοδο μελετήσαμε την επίλυση γραμμικών μοντέλων τύπου stripe εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs. Ειδικότερα σχεδιάσαμε έναν παράλληλο αλγόριθμο υλοποίησης της dDHC μεθόδου και μελετήσαμε στην συνέχεια την αποδοτικότητα εκτέλεσής του σε υπολογιστικά περιβάλλοντα επιταχυντών από γραφικά υποσυστήματα υπολογισμών (GPUs).

1.3 Αναγνώριση, Ψηφιοποίηση και Διακριτοποίηση Ετερογενών Περιοχών MRI Απεικόνισης Εγκεφάλου

Με στόχο την επικύρωση των αποτελεσμάτων μας και σε προβλήματα εξέλιξης καρκινικών όγκων στην πραγματική γεωμετρία του εγκεφάλου, όπως αυτή απεικονίζεται από τεχνικές MRI, σχεδιάσαμε έναν αλγόριθμο ανάγνωσης της πληροφορίας που περιέχεται σε μία απεικόνιση MRI και αναγνώρισης των συνόρων μεταξύ των ανομοιογενών περιοχών της λευκής και φαιάς ουσίας. Στη συνέχεια η πληροφορία αυτή αξιοποιείται με την κατάλληλη διακριτοποίηση (τριγωνοποίηση) των διαφορετικών χωρίων και την αναγνώρισή τους από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS. Η δράση αυτή εξελίσσεται με συνεργασία ιατρικής ομάδας του Ναυτικού Νοσοκομείου Χανίων.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα αποτελέσματα ενώ στις επόμενες δύο αναφέρουμε τις συνεργασίες που προέκυψαν κατα τη διάρκεια του έτους καθώς και τους μελλοντικούς στόχους.

2 Μεθοδολογία

2.1 dDHC και IMEX RK σχήματα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου

Η βασική μη-γραμμική reaction-diffusion ΜΔΕ που χρησιμοποιείται για την περιγραφή της συγκέντρωσης $\bar{c}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{t})$ των καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο γράφεται στη μορφή:



$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{x}, \bar{y}) \nabla \bar{c} \right) + \rho \bar{c} (1 - \frac{\bar{c}}{K})$$
(1)

όπου το K χαρακτηρίζει τη φέρουσα ικανότητα (carrying capacity) του εγκεφάλου, και οι D και ρ τους συντελεστές διάχυσης και αύξησης (proliferation) των καρκινικών κυττάρων, όπως ήδη έχουμε εξηγήσει σε προηγούμενες Τεχνικές Εκθέσεις.

Για την αδιάστατη μορφή του προβλήματος-μοντέλου, χρησιμοποιούμε τις μεταβλητές:

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \ , \ y = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{y} \ , \ t = \rho \bar{t} \\ c(x, y, t) &= \frac{1}{K} \bar{c} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}, \ \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{y}, \ \rho \bar{t} \right) \frac{D_w}{\rho N_0} \ , f(x, y) = \frac{1}{K} \bar{f} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}, \ \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{y} \right) \end{aligned}$$

όπου $N_0 = \int \overline{f}(\overline{x}) d\overline{x}$ δηλώνει τον αρχικό ρυθμό καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο για $\overline{t} = 0$, και καταλήγουμε στο ΠΑΣΣ-ΠΠ:

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) , & (x,y) \in [a,b]^2 , t \ge 0 \\ \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 & \text{Kal} \quad c(x,y,0) = f(x,y) \end{cases}$$
(2)

όπου ο συντελεστής διάχυσης *D* είναι ασυνεχής, χαρακτηρίζοντας την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού, και απεικονίζεται στο Σχ. 1 σε ένα ορθογώνιο πεδίο λευκής-φαιάς-λευκής ουσίας τύπου stripe.



Σχήμα 1: Συντελεστής διάχυσης D για ένα πεδίο λευκής-φαιάς-λευκής ουσίας.

Ο συγκεκριμένος τύπος χωρίου μας επιτρέπει την χρήση τανυστικών και Hadamard γινομένων για την ανάπτυξη των dDHC εξισώσεων, όπως έχουμε



Τεχνική Έκθεση 2014

αναπτύξει στις τεχνικές εκθέσεις της Δράσης 2.1, και μας οδηγεί στο αντίστοιχο μη-γραμμικό ΣΔΕ που γράφεται ως:

$$A_{\tilde{0}0}\dot{\boldsymbol{a}} = (D_x A_{\tilde{2}0} + D_x A_{\tilde{0}2} + A_{\tilde{0}0}) \boldsymbol{a} - (A_{\tilde{0}0} \boldsymbol{a}) \circ (A_{\tilde{0}0} \boldsymbol{a})$$

όπου

$$A_{\tilde{m}n} = \tilde{C}_m \otimes C_n$$

με \tilde{C}_m να συμβολίζουν τους μονοδιάστατους Collocation πίνακες που προέρχονται από τα ασυνεχή Hermite πολυώνυμα και C_m να συμβολίζουν τους μονοδιάστατους Collocation πίνακες που προέρχονται από τα συνεχή Hermite πολυώνυμα ενώ D_x είναι ένας διαγώνιος πίνακας με στοιχεία το συντελεστή διάχυσης κάθε εξίσωσης του collocation αλγεβρικού συστήματος.

Γράφοντας στη συνέχεια το παραπάνω σύστημα ΣΔΕ ως

$$\dot{\boldsymbol{lpha}} = \mathcal{L}_d\left(\boldsymbol{lpha}\right) + \mathcal{N}_d\left(\boldsymbol{lpha}\right)$$
 (3)

με

$$\mathcal{L}_{d}\left(\boldsymbol{\alpha}\right) := A_{\tilde{0}0}^{-1}\left(D_{x}A_{\tilde{2}0} + D_{x}A_{\tilde{0}2} + A_{\tilde{0}0}\right)\boldsymbol{a}$$

και

$$\mathcal{N}_{d}\left(oldsymbol{lpha}
ight) := -A_{ ilde{0}0}^{-1}\left[\left(A_{ ilde{0}0}oldsymbol{a}
ight) \circ \left(A_{ ilde{0}0}oldsymbol{a}
ight)
ight]$$

για να χαρακτηρίσουμε τους γραμμικούς και τους μη-γραμμικούς όρους του συστήματος, τα δύο αριθμητικά σχήματα IMEX RK δεύτερης και τρίτης τάξης που χρησιμοποιούμε για την επαναληπτική επίλυσή του δίδονται από τις σχέσεις:

IMEX(3,3,2) RK

$$\boldsymbol{\alpha}^{(1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \lambda \Delta t \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(2)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \Delta t \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right) + \Delta t \left(1 - 2\lambda \right) \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right)$$
$$+ \lambda \Delta t \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)} \right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(3)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \frac{\Delta t}{4} \left(\mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right) + \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)} \right) \right) +$$
$$+ \frac{\Delta t (1 - 2\lambda)}{2} \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right) + \lambda \Delta t \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)} \right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(n+1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \Delta t \left[\mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right) + \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)} \right) +$$
$$+ 4 \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)} \right) + \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)} \right) + \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)} \right)$$
$$+ 4 \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)} \right) \right]$$



IMEX(4,3,3) RK

$$\boldsymbol{\alpha}^{(1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \lambda_1 \Delta t \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)}\right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(2)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} - \lambda_1 \left(\Delta t \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)}\right) - \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right)\right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(3)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \Delta t \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right) +$$
$$+ \Delta t \left((1 - \lambda_1) \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right) + \lambda_1 \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)}\right)\right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(4)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \frac{\Delta t}{4} \left(\mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right) + \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)}\right)\right) +$$
$$+ \Delta t \left(\lambda_2 \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(1)}\right) + \lambda_3 \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right) +$$
$$+ \left(\frac{1}{2} - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3\right) \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)}\right) + \lambda_1 \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(4)}\right)\right)$$
$$\boldsymbol{\alpha}^{(n+1)} = \boldsymbol{\alpha}^{(n)} + \Delta t \left[\mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right) + \mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)}\right) +$$
$$+ 4\mathcal{N}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(4)}\right) + \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(2)}\right) + \mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(3)}\right) +$$
$$+ 4\mathcal{L}_d \left(\boldsymbol{\alpha}^{(4)}\right)\right]$$

όπου, $\lambda = 1 - \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\lambda_1 = 0.24169426078821$, $\lambda_2 = 0.06042356519705$ and $\lambda_3 = 0.12915286960590$.

Όπως εύκολα μπορεί να παρατηρήσει κανείς, τα σχήματα IMEX διατηρούν όλα τα αλγεβρικά συστήματα που εμπλέκονται στο σχήμα γραμμικά.

2.2 Απεικόνιση των dDHC εξισώσεων για γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs

Για την απεικόνιση των υπολογισμών σε παράλληλες αρχιτεκτονικές τύπου CPU-GPU, θεωρούμε την εφαρμογή της dDHC σε ένα γραμμικό μοντέλο ανάπτυξης καρκινικών όγκων και συνεπώς, ανακαλώντας το συμβολισμό και τις σχέσεις της προηγούμενης παραγράφου, το collocation σύστημα ΣΔΕ στο οποίο αναφερόμαστε έχει την μορφή:

$$A_{\tilde{0}0}\dot{a} = D_x \left(A_{\tilde{2}0} + A_{\tilde{0}2} \right) a , \qquad (5)$$

ή, ισοδύναμα,

$$A_0 \dot{\boldsymbol{a}} = B \boldsymbol{a} \ , \ A_0 := A_{\tilde{0}0} \ , \ B := D_x \left(A_{\tilde{2}0} + A_{\tilde{0}2} \right) \ .$$
 (6)

Για για τη χρονική διακριτοποίηση του παραπάνω συστήματος ΣΔΕ θεωρούμε το Diagonally implicit Runge-Kutta [2] σχήμα δύο βημάτων και τρίτης τάξης, που έχει τη γνωστή μορφή:



$$A \boldsymbol{a}^{(n,1)} = A_0 \boldsymbol{a}^{(n)}$$

$$A \boldsymbol{a}^{(n,2)} = A_0 \boldsymbol{a}^{(n)} + \tau (1 - 2\lambda) B \boldsymbol{a}^{(n,1)} .$$

$$A_0 \boldsymbol{a}^{(n+1)} = A_0 \boldsymbol{a}^{(n)} + \frac{\tau}{2} B (\boldsymbol{a}^{(n,1)} + \boldsymbol{a}^{(n,2)})$$
(7)

όπου $\tau := \Delta t \equiv dt$ συμβολίζει το χρονικό βήμα, $A := A_0 - \tau \lambda B$, και $\lambda = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$. Για την επίλυση του παραπάνω συστήματος γραμμικών εξισώσεων προτείνεται ο ακόλουθος αλγόριθμος:

Γίνεται αντιληπτό, ότι για τα δύο πρώτα βήματα του αλγορίθμου χρησιμοποιείται ο πίνακας A_b για την επίλυση του γραμμικού συστήματος, όπου $A_b := A_0 - \tau B$. Η χρήση του πίνακα δικαιολογείται από την εφαρμογή της μεθόδου Backward Euler, που ενδείκνυται σε περίπτωση εμφάνισης ταλαντώσεων, για έναν αριθμό αρχικών βημάτων. Από 'κεί και έπειτα, στη διαδικασία επίλυσης συμμετέχουν οι πίνακες A, A_0 και B που προκύπτουν από το σχήμα DIRK. Για την επίλυση των γραμμικών συστημάτων, επιλέγεται η χρήση επαναληπτικής μεθόδου καθότι οι συγκεκριμένοι πίνακες είναι μεγάλοι και αραιοί. Για την επιλογή ανάμεσα σε στατική μέθοδο ή μέθοδο υποχώρων Krylov, λαμβάνεται υπ'όψιν το γεγονός ότι μια στατική μέθοδος θα απαιτούσε διάσπαση του πίνακα στη μορφή A =





Σχήμα 2: Στην αριστερή στήλη τα διαγράμματα των ιδιοτιμών των πινάκων A_b, A_0 και A, αντίστοιχα, και στη δεξιά οι ιδιοτιμές που αντιστοιχούν μετά την εφαρμογή της τεχνικής προρύθμισης.



D – L – U, κάτι που λόγω της φύσης και των ιδιοτήτων των συγκεκριμένων πινάκων είναι προτιμότερο να αποφευχθεί. Συνεπώς, επιλέγεται χρήση μεθόδου υποχώρων Krylov, και συγκεκριμένα της BiCGSTAB για την επίλυση των τριών γραμμικών συστημάτων σε κάθε επαναληπτικό βήμα του αλγορίθμου. Η επιλογή της συγκεκριμένης μεθόδου υποστηρίζεται και λαμβάνοντας υπ'όψη τις ιδιοτιμές του πίνακα που συμμετέχει στην επίλυση του γραμμικού συστήματος.

Ο υπολογισμός των ιδιοτιμών των πινάκων (Σχ. 2) υποδεικνύει ότι μια κατάλληλη τεχνική προρύθμισης θα ευνοούσε το ρυθμό σύγκλισης της μεθόδου. Υπενθυμίζεται ότι οι πίνακες είναι αποθηκευμένοι σε αραιοί μορφή και για το λόγο αυτό, θεωρούμε ότι η ατελής LU παραγοντοποίηση κάθενος από τους πίνακες A_b, A_0 και A είναι κατάλληλη επιλογή για προρυθμιστής, δηλαδή $M_{A_b} := iLU(A_b), M_{A_0} := iLU(A_0)$ και $M_A := iLU(A)$. Ένα βασικό στοιχείο, το οποίο πρέπει να τονιστεί, είναι ότι και οι τρείς πίνακες δε μεταβάλλονται, ανεξαρτήτως των χρονικών βημάτων, συνεπώς ο υπολογισμός της incomplete LU παραγοντοποίησης τους πραγματοποιείται μόνο μια φορά, πριν την έναρξη της χρονικής διαδικασίας.

Μετά την εφαρμογή της τεχνικής προρύθμισης, είναι ξεκάθαρο ότι οι ιδιοτιμές για κάθε ένα απο τους πίνακες, παίρνουν τιμές κοντά στη μονάδα, κοντά στο θετικό ημιάξονα των x, επιβεβαιώνοντας την καταλληλότητα του προρυθμιστή και υποδεικνύοντας τη χρήση της μεθόδου BiCGSTAB έναντι της GMRES [43].

Παράλληλος Αλγόριθμος

Ο προτεινόμενος αλγόριθμος περιλαμβάνει την επίλυση τριών γραμμικών συστημάτων εντός μιας χρονικής διαδικασίας, με τη χρήση τριών πινάκων, ανεξάρτητων του χρονικού βήματος, όπως προαναφέρθηκε. Η κάθε επίλυση πραγματοποιείται με χρήση επαναληπτικής μεθόδου, στην οποία κυριαρχούν από υπολογιστικής άποψης βασικές πράξεις γραμμικής άλγεβρας. Συνεπώς, επιλέγεται ένα υβριδικό μοντέλο εκτέλεσης του αλγορίθμου, που θα εκτελεί τις σειριακές διαδικασίες όπως οι εμπρός και πίσω αντικαταστάσεις, στον κεντρικό επεξεργαστή (CPU) ενώ οι υπολογιστικά απαιτητικές διαδικασίες θα εκτελούνται σε γραφικό υποσύστημα (GPU). Υπενθυμίζεται ότι ένα γραφικό υποσύστημα αποτελείται μεταξύ άλλων από μεγάλο αριθμό υπολογιστικών πυρήνων που έχουν τη δυνατότητα εκτέλεσης εκατοντάδων παράλληλων διεργασιών ο καθένας, ενεργώντας σε μοντέλο Single Instruction Multiple Data, γεγονός που το καθιστά εξαιρετική επιλογή για τη διενέργεια πράξεων όπως πολλαπλασιασμός πίνακα με διάνυσμα.

Ο παράλληλος αλγόριθμος που ακολουθεί περιγράφει την κατασκευή των πινάκων A_b, A₀, A, B και του διανύσματος a_{old} καθώς και τον υπολογισμό της *iLU* πραγοντοποίησης των πινάκων που πραγματοποιείται στο CPU. Τα δεδομένα αντιγράφονται στη μνήμη του γραφικού υποσυστήματος πριν την έναρξη της χρονικής διαδικασίας και από 'κει και έπειτα η συντριπτική πλειοψηφία των



πράξεων κινητής υποδιαστολής πραγματοποιείται στο γραφικό υποσύστημα. Οι αντιγραφή από και προς τη μνήμη του κεντρικού επεξεργαστή που πραγματοποιείται σε κάθε χρονικό βήμα σχετίζεται με το μήκος του διανύσματος που χρειάζεται ο κεντρικός επεξεργαστής για να εκτελέσει τις εμπρός και πίσω αντικαταστάσεις για την επίλυση του γραμμικού συστήματος της προρύθμισης με τους πίνακες συντελεστών M_{A_b} , M_{A_0} και M_A .

Δημιουργία πινάκων στο CPU A_b, A_0, A, B και a_{old} Υπολογισμός στο CPU των iLU παραγοντοποιήσεων των A_b, A_0 και A Αντιγραφή των πινάκων από CPU σε GPU A_b, A_0, A, B και a_{old} for t = dt to t_{max} με χρονικό βήμα dtΥπολογισμός παράλληλα στη GPU $a_0 = A_0 a_{old}$ if t < 2dt then Επίλυση παράλληλα στη GPU $A_b a_{new} = a_0$ με BiCGSTAB else Επίλυση παράλληλα στη GPU $Aa_1 = a_0$ με BiCGSTAB Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $\tilde{a}_0 = a_0 - dt \frac{\sqrt{3}}{2} B a_1$ Επίλυση παράλληλα στη GPU $Aa_2 = \tilde{a}_0$ με BiCGSTAB Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $a_2 = a_0 + \frac{dt}{2}B(a_1 + a_2)$ Επίλυση παράλληλα στη GPU $A_0 a_{new} = a_2$ με BiCGSTAB endif Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $a_{old} = a_{new}$ endfor Αποστολή από GPU σε CPU του διανύσματος της λύσης a_{new}

Η προρυθμισμένη GPU - BiCGSTAB μέθοδος περιγράφεται με τον παρακάτω παράλληλο αλγόριθμο για την επίλυση του γραμμικού συστήματος Ax = b:



Επιλογή αρχικής προσέγγισης $m{x}^{(0)}$ της λύσης $m{x}$ Υπολογισμός σε GPU $r^{(0)} = oldsymbol{b} - Aoldsymbol{x}^{(0)}$ Επιλογή \hat{r} (συνήθως $\hat{r} = r^{(0)}$) for i = 1, 2, ...Υπολογισμός σε GPU $\rho_{i-1} = \hat{r}^T r^{(i-1)}$ if $\rho_{i-1} = 0$ η μέθοδος αποτυγχάνει if i = 1Υπολογισμός σε GPU $p^{(1)} = r^{(0)}$ else $\beta_{i-1} = \frac{\rho_{i-1}}{\rho_{i-2}} \frac{\alpha_{i-1}}{\omega_{i-1}}$ Υπολογισμός σε GPU $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)})$ endif Αποστολή από GPU σε CPU $p^{(i)}$ Επίλυση σε CPU $L y = p^{(i)}$ Επίλυση σε CPU $U \hat{p} = y$ Αποστολή από CPU σε GPU \hat{p} Υπολογισμός σε GPU $v^{(i)} = A \hat{p}$ Υπολογισμός σε GPU $\alpha_i = \frac{\rho_{i-1}}{\hat{\sigma}T_{i}(i)}$ Υπολογισμός σε GPU $s = r^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}$ if || s || είναι αρκετά μικρό then Υπολογισμός σε GPU $oldsymbol{x}^{(i)} = oldsymbol{x}^{(i-1)} + lpha_i \, \hat{p}$ τέλος Αποστολή από GPU σε CPU s *Επίλυση σε CPU L* y = sEπίλυση σε CPU U z = yΑποστολή από CPU σε GPU z Υπολογισμός σε GPU t = A zΥπολογισμός σε GPU $\omega_i = \frac{s^T t}{t^T t}$ Υπολογισμός σε GPU $\boldsymbol{x}^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p} + \omega_i z$ Έλεγχος σύγκλισης if $ω_i = 0$ τέλος Υπολογισμός σε GPU $r^{(i)} = s - \omega_i t$ end





Σχήμα 3: Προσεγγίσεις λύσεων του προβλήματος για το αριθμητικό σχήμα 2D DHC-DIRK στα δεξιά, ενώ στα αριστερά τα ισοϋψή γραφήματα τους για τα χρονικά βήματα t = 1, 2, 3 και 4 αντίστοιχα.



2.3 Αναγνώριση, Ψηφιοποίηση και Διακριτοποίηση Ετερογενών Περιοχών MRI Απεικόνισης Εγκεφάλου

Για την αναγνώριση, ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση ετερογενών περιοχών εγκεφάλου από MRI απεικονίσεις έγινε χρήση σειρά εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού (Matlab, GMSH) προς την τελική εισαγωγή κατάλληλων δεδομένων στην πλατφόρμα λογισμικού FeniCS.

Πιο συγκεκριμένα, το FeniCS διαθέτει μια σειρά από ενσωματωμένα εργαλεία περιγραφής και διακριτοποίησης των περιοχών ορισμού των προβλημάτων που πρόκειται να επιλυθούν στη συνέχεια με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Η χρήση όμως αυτών των εργαλείων περιορίζεται σε σχετικά απλά γεωμετρικά χωρία, ενώ για τη περιγραφή πεδίων ορισμού προβλημάτων πολύπλοκης γεωμετρίας καθώς και για τη διακριτοποίηση τους υπάρχει συνεργασία του λογισμικού με διάφορα πιο εξειδικευμένα πακέτα λογισμικού. Το πιο εύχρηστο και δημοφιλές λογισμικό για αυτό το σκοπό είναι το GMSH [36], το οποίο επιλέχθηκε και χρησιμοποιήθηκε στη παρούσα μελέτη. Επιπλέον, δημιουργήσαμε ένα αλγόριθμο με τον οποίο μπορούμε να διακρίνουμε τις διαφορετικές περιοχές σε μια λήψη MRI υγιούς εγκεφάλου.



Αρχικά η εικόνα της μαγνητικής τομογραφίας MRI εισάγεται στο λογισμικό MatLab, ώστε να γίνει εφικτός ο διαχωρισμός των διαφορετικών περιοχών του εγκεφάλου. Έτσι κάνοντας χρήση των δυνατοτήτων του Image Processing Toolbox είναι δυνατή η ομαδοποίηση περιοχών της εικόνας σε δέκα αποχρώσεις του γκρι όπως εμφανίζει η επόμενη εικόνα.





Στη συνέχεια επιλέγονται οι περιοχές ενδιαφέροντος από την εικόνα και ομαδοποιούνται οι περιοχές σε αυτές με τις τρεις πιο κοντινές αποχρώσεις και η εικόνα περνάει από μια διαδικασία φιλτραρίσματος στην οποία διαγράφονται όλες οι περιοχές με χαμηλή συγκέντρωση pixel ενός χρώματος. Η διαδικασία αυτής της ομαδοποίησης εμφανίζεται στις παρακάτω τρεις εικόνες







Στο τελικό στάδιο επεξεργασίας της εικόνας επιλέγονται τα όρια των διαφορετικών αποχρώσεων από τις βασικότερες και μεγαλύτερες περιοχές, τα οποία αποθηκεύονται σε κατάλληλη ψηφιακή μορφή, ώστε να μπορούν να εισαχθούν ως αρχεία δεδομένων σε άλλα λογισμικά. Η ψηφιακή πληροφορία των συνόρων περιλαμβάνει τις συντεταγμένες των σημείων που ορίζουν τα όρια των περιοχών. Τα σύνορα των περιοχών ενδιαφέροντος για το πρόβλημα μοντέλο εμφανίζει η επόμενη εικόνα.



Η εικόνα σε ψηφιακή μορφή που περιγράφει τα όρια των περιοχών του εγκεφάλου εισάγεται στο λογισμικό GMSH, ώστε να οριστούν οι διαφορετικές περιοχές διακριτοποίησης, οι περιοχές ασυνέχειας καθώς και τα σύνορα ορισμού κάθε προβλήματος περιοχής. Μέσω του ίδιου λογισμικού θα γίνει και η διακριτοποίηση των περιοχών για κάθε πρόβλημα. Η παρακάτω εικόνα εμφανίζει την αρχική διαδικασία ορισμού όλων των συνόρων με τη χρήση splines.





Στη συνέχεια ορίζονται οι περιοχές που περικλείονται καθώς και τα σύνορα ασυνέχειας ανάμεσα τους μαζί με τα εξωτερικά σύνορα για κάθε πρόβλημα όπως αυτά ορίζονται σε κάθε περιοχή. Έτσι υπάρχει πλέον διαθέσιμη όλη η πληροφορία ώστε να επιτευχθεί η κατάλληλη διακριτοποίηση. Η παρακάτω εικόνα εμφανίζει την διακριτοποίηση που έγινε στο πρόβλημα δοκιμών.



Η εικόνα που ακολουθεί εμφανίζει με λεπτομέρεια την διακριτοποίηση με χρήση τριγωνικών πεπερασμένων στοιχείων σε δυο περιοχές του εγκεφάλου. Διακρίνεται το περίγραμμα του εξωτερικού συνόρου καθώς και του εσωτερικού με την ασυνέχεια μεταξύ των δυο περιοχών.





Η συνολική πληροφορία της διακριτοποίησης μαζί με αυτήν των εξωτερικών και εσωτερικών συνόρων κάθε περιοχής ορισμού του προβλήματος εισάγεται στο λογισμικό Fenics με την παραγωγή από το λογισμικό GMSH κατάλληλου αρχείου τύπου .mesh καθώς και τριών αρχείων τύπου xml τα οποία περιέχουν τις πληροφορίες της συνολικής διακριτοποιημένης περιοχής, των επιμέρους περιοχών και των συνόρων τους. Στη συνέχεια εμφανίζεται ο κατάλληλος κώδικας Fenics σε python όπου μέσω των τριών xml αρχείων εισάγεται η συνολική πληροφορία διακριτοποίησης και περιγραφής του προβλήματος.



Η επόμενη εικόνα εμφανίζει τις διαφορετικές περιοχές του προβλήματος, όπως αυτές έχουν εισαχθεί το λογισμικό FeniCS.



Το επόμενο γράφημα εμφανίζει τα όρια των περιοχών ασυνέχειας.





Η συνολική πληροφορία διακριτοποίησης με τα πεπερασμένα στοιχεία μαζί με τα όρια των περιοχών ασυνέχειας εμφανίζονται στη συνέχεια, ενώ ακολουθεί ένα λεπτομερές γράφημα μιας περιοχής όπου εμφανίζεται με μεγαλύτερη ακρίβεια η διακριτοποίηση του προβλήματος.





Τεχνική Έκθεση 2014



3 Αποτελέσματα

3.1 dDHC και IMEX RK σχήματα για μη-γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου

Θεωρούμε την εξίσωση

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) , & (x,y) \in [-4,4]^2 , t \ge 0 \\ \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \quad \text{Kal} \quad c(x,y,0) = f(x) \end{cases}$$
(8)

με

$$D = \begin{cases} \gamma & , \quad (x,y) \in [-4,-2) \cup [-4,4] \\ 1 & , \quad (x,y) \in [-2,2) \cup [-4,4] \\ \gamma & , \quad (x,y) \in [-2,4) \cup [-4,4] \end{cases}$$

Τα αποτελέσματα από την υλοποίηση των σχημάτων dDHC και IMEX RK απεικονίζονται στα σχήματα που ακολουθούν και αναδεικνύουν τόσο το προφίλ της λύσης όσο και την τετάρτη τάξη σύγκλισης της dDHC μεθόδου.





Σχήμα 4: Η αριθμητική λύση της μη γραμμικής εξίσωσης στις 2+1 διαστάσεις.



Σχήμα 5: Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC.

3.2 Απεικόνιση των dDHC εξισώσεων για γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου σε GPUs

Οι υλοποιήσεις του κώδικα της παραγράφου 2.2 πραγματοποιήθηκαν σε μηχάνημα κοινής μνήμης HP SL390s G7, με 2 6-πύρηνους Xeon X5600@2.8 GHz



επεξεργαστές, ο καθένας εκ των οποίων διαθέτει 12 MB Level 3 μνήμης cache. Η συνολική μνήμη του συστήματος είναι 24 GB, ενώ το λειτουργικό σύστημα είναι Oracle's Linux, έκδοσης 6.2. Επιπλέον, το σύστημα διαθέτει γραφικό υποσύστημα τύπου Fermi σειράς Tesla M2070, με 6 GB μνήμης και 448 πυρήνες σε 14 πολυεπεξεργαστές. Οι χρονικές συγκρίσεις έγιναν μεταξύ 2 διαφορετικών εφαρμογών που αναπτύχθηκαν. Η πρώτη αναπτύχθηκε στο λογισμικό Matlab R2012b [37] και εκτελείται μόνο στον κεντρικό επεξεργαστή με χρήση πολλαπλών νημάτων, ενώ η δεύτερη αναπτύχθηκε σε PGI's 14.5 CUDA Fortran [39] και εκτελείται σε περιβάλλον CPU-GPU. Σε αυτή την περίπτωση χρησιμοποιήθηκαν υποπρογράμματα από τις βιβλιοθήκες cuBLAS και cuSPARSE [?] (για διεργασίες στη GPU) και από τη SparseKit (για διεργασίες στη CPU) από την πλατφόρμα CUDA 6.0. Πρέπει να σημειωθεί ότι το λογισμικό Matlab δεν υποστηρίζει τη χρονική στιγμή της συγγραφής της παρούσας εργασίας πράξεις αραιών πινάκων σε γραφικά υποσυστήματα.

Στην αναπαράσταση της λύσης (Σχ. 3), η εξέλιξη του εγκεφαλικού όγκου στο χρόνο, φανερώνει την επιτυχή συμπεριφορά του αριθμητικού σχήματος στο πρόβλημα. Οι ασυνέχειες είναι ορατές στην περίπτωση του προβλήματος με stripes, όπως επίσης και επιτυχής αντιμετώπιση τους.

Ο παρακάτω πίνακας περιέχει τις χρονικές μετρήσεις για τη περίπτωση της Matlab multithread CPU υλοποίησης καθώς και για την CUDA Fortran CPU-GPU, σε διαφορετικές περιπτώσεις διακριτοποίησης, συγκεκριμένα για n_s=400, 1600, 6400 και 25600 πεπερασμένα στοιχεία σε κάθε κατεύθυνση. Το μέγεθος των γραμμικών συστημάτων κάθε φορά είναι ίσο με τον αριθμό των αγνώστων, ενώ αναφέρονται και οι βαθμοί ελευθερίας (dof) για κάθε πρόβλημα.

n_s	# αγνώστων	dof	CPU Matlab Time	CPU - GPU Time
400	1600	6400	0.7	0.4
1600	6400	25600	2.1	1.1
6400	25600	102400	11	5.2
25600	102400	409600	192	91

Πέραν των συγκρίσεων επί των χρονικών αποτελεσμάτων, με χρήση της εφαρμογής NVIDIA Visual Profiler παρατηρήθηκαν και αναφέρονται τα παρακάτω σχετικά με την εκτέλεση στο γραφικό υποσύστημα. Αρχικά, σχετικά με το κόστος επικοινωνίας ανάμεσα στη μνήμη του κεντρικού επεξεργαστή και της μνήμης του γραφικού υποσυστήματος, η διάρκεια αντιγραφής από και προς τη μια και την άλλη κατεύθυνση είναι δεν μεταβάλλεται για το ίδιο μέγεθος δεδομένων, για παράδειγμα, στην περίπτωση των 25600 πεπερασμένων στοιχείων είναι λιγότερο από 1 sec, ενώ για περιπτώσεις λιγότερων πεπερασμένων στοιχείων παρατηρήθηκε αντίστοιχη συμπεριφορά. Επιπλέον, επιβεβαιώνεται ότι η διαδικασία πολλαπλασιασμού πίνακα-διανύσματος είναι η πλέον ακριβή υπολογιστικά. Στην περίπτωση των 25600 πεπερασμένων στοιχείων, πολλαπλασιασμός



πραγματοποιήθηκε 5008 φορές, καταναλώνοντας το 64% του χρόνου της διαδικασίας επί της GPU, ενώ η διαδικασία πρόσθεσης διανυσμάτων η οποία πραγματοποιήθηκε 13450 φορές διήρκεσε το 11% του χρόνου της εκτέλεσης.

Συμπερασματικά, αναπτύχθηκε ένας νέος παράλληλος αλγόριθμος για τη μέθοδο Ασυνεχής Hermite Collocation για αρχιτεκτονικές με επιταχυντές. Ο αλγόριθμος εκτελέστηκε σε μηχανήματα με γραφικά υποσυστήματα και τα χρονικά αποτελέσματα συγκρίθηκαν με εκτελέσεις όπου έγινε χρήση του λογισμικού Matlab με χρήση πολλαπλών πυρήνων. Τα αποτελέσματα παρουσιάζουν την αποδοτικότητα της εκτέλεσης με το υβριδικό μοντέλο CPU-GPU καθώς η επιτάχυνση που παρατηρείται είναι τάξης 2x, ειδικά σε περιπτώσεις πυκνής διακριτοποίησης.

4 Παραδοτέα

- Παρουσιάσεις σε διεθνή συνέδρια ως εξής:
 - Ι. Αθανασάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, "Discontinuous Hermite Collocation and Runge-Kutta schemes for multi-domain linear and non-linear brain tumor invasion models", NUMAN 2014, CMA 2014
 - Ι. Αθανασάκης, Ν. Βιλανάκης, Ε. Μαθιουδάκης, "Solving discontinuous collocation equations for a class of brain tumor models on GPUs", NUMAN 2014, CMA 2014
- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη και καθ. Ε. Παπαδοπούλου, επ.καθ. Ε. Μαθιουδάκη, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη. Για την κατανόηση και την επεξεργασία MRI απεικονίσεων για το καθορισμό των ετερογενών περιοχών του εγκεφάλου συνεργαστήκαμε με ιατρική ομάδα του Ναυτικού Νοσοκομείου Χανίων.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Οι μελλοντικές δράσεις που σχεδιάζουμε περιλαμβάνουν:



- Επίλυση γενικευμένων μη-γραμμικών βιολογικών μοντέλων με dDHC / RK μεθόδους
- Μελέτη μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου που ενσωματώνουν και την επίδραση ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας
- Επίλυση μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου πραγματικής γεωμετρίας με χρήση της πλατφόρμας FEniCS.
- Συγγραφή και δημοσίευση των αποτελεσμάτων

Αναφορές

- [1] Akrivis G Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012
- [2] R. Alexander "Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE's", *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.
- [3] C. de Boor and B. Swartz "Collocation at Gaussian points", *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.
- [4] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a threedimensional mathematical model of gliomas", *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*, vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.
- [5] J.C. Butcher "Implicit Runge-Kutta processes", *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.
- [6] J.C.Butcher "The numerical analysis of ordinary differential equations ," *John Wiley* , 1987.
- [7] Cherniha R and Dutka V *Exact and Numerical Solutions of the Generalized Fisher Equation*, Reports on Mathematical Physics, **47**, 393-412, 2001
- [8] M. Crouzeix "Sur l'approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par desmethodes de Runge Kutta", *PhD Thesis*, University Paris VI, Paris, 1975.
- [9] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The modeling of diffusive tumours," *Journal of Biological Systems*, vol.3, pp.937-945, 1995.



- [10] de Boor C and Swartz B Collocation at Gaussian points, SIAM Num. Anal., vol. 10, pp. 582-606, 1973
- [11] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006
- [12] Fisher RA The wave of advance of advantageous genes, Ann. Eugen., 7, 255-369, 1937
- [13] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001
- [14] Gottlieb S and Shu CW Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, Mat. Comp., 67, 73-85, 1998
- [15] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., **1(6)**, 1-25, 1937
- [16] Hairer E *Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations*, Numer. Math., **35**, 57-68, 1980
- [17] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989
- [18] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [19] Murray JD Mathematical Biology, Springer, Berlin, 1989
- [20] M.G. Papadomanolaki "The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations", *PhD Thesis*, Technical University of Crete, 2012 (in Greek)
- [21] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010
- [22] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002
- [23] Schmitt B Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations, BIT, 28, 884-897, 1988



- [24] Shu CW Total-variation-diminishing time discretizations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9, 1073-1084, 1988
- [25] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988
- [26] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.
- [27] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [28] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.
- [29] K.R.Swanson, C.Bridge, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr "Virtual and real brain tumours: using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.
- [30] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.
- [31] D.E.Woodward, J.Cook, P.Tracqui, G.C.Cruywagen, J.D.Murray, and E.C.Alvord Jr."A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection," *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.
- [32] H. der Vorst, Bi-CGSTAB, A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci.Stat.Comp., 13: 631-644, 1992.
- [33] R. Varga, Matrix Iterative Analysis, New York: Springer Verlag, 2000.
- [34] Chandra Rohit, Parallel programming with OpenMP, M.K., 2001.
- [35] http://www.fenicsproject.org.
- [36] http://geuz.org/gmsh/.
- [37] http://www.mathworks.com.
- [38] http://www.nvidia.com/object/tesla-servers.html.
- [39] http://www.pgroup.com.



- [40] http://www.netlib.org.
- [41] http://www.openmp.org.
- [42] http://www.openacc.org.
- [43] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems, SIAM, 2003.
- [44] J. Dongarra and I. Duff and D. Sorensen and H. van der Vorst, *Numerical Linear Algebra for high-performance computers*, SIAM, 1998.
- [45] C.E. Houstis, E.N. Houstis, and J. Rice, *Pde computations: Methods and performance evaluation*, Par. Comp., 5: 141-163, 1997.
- [46] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Iterative solution of elliptic collocation systems on a cognitive parallel computer*, Computers and Maths with Appl., 48: 951-970, 2004.
- [47] E.N. Marhioudakis, E. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Mapping parallel iterative algorithms for pde computations on a distributed memory computers*, Parallel Algorithms and Applications, 8: 141-154, 1996.
- [48] E.N. Marhioudakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Bi-CGSTAB for collocation equations on distributed memory parallel computers*, Numerical Mathematics and advanced applications ENUMATH 2001, Springer, 957-966, 2003.
- [49] E. Mathioudakis and E. Papadopoulou, *Grid computing for the bi-cgstab applied to the solution of the modified helmholtz equation*, Int. J. App. Maths and comp. sciences, (4) 3: 179-184, 2007.
- [50] T. Papatheodorou, *Block aor iteration for nonsymmetric matrices*, Math. Comp., (41) 164: 511-525, 1983.
- [51] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Preconditioning for solving hermite collocation by the bi-cgstab*, WSEAS Trans. on Mathematics, (5) 7: 811-816, 2006.
- [52] C.C.Christara, *Parallel solvers for spline collocation equations*, Advances in Engineering Software, 27: 71-89, 1996.
- [53] S.H.Brill and G.F.Pinder, Parallel implementation of the bi-cgstab method with block red-black gauss-seidel preconditioner applied to the hermite collocation discretization of partial differential equations, Parallel Computing, 28: 399-414, 2002.



Τεχνική Έκθεση 2014

[54] E. Mathioudakis, N. Vilanakis, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs, Proc. of the World Congress on Engeneering 2013 (WCE2013, Imperial College -London, U.K.), Best Paper Award of The 2013 International Conference of Parallel and Distributed Computing, 2: 1281-1286, 2013.

