

# Ετήσια Έκθεση Προόδου

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλών πεδίων (multi physics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)



## Περιεχόμενα

|                                                                                              |            |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>1 Δράση 1: Συντονισμός Έργου</b>                                                          | <b>4</b>   |
| 1.1 Σκοπός . . . . .                                                                         | 4          |
| 1.2 Δραστηριότητες Έτους 2012 . . . . .                                                      | 4          |
| <b>2 Δράση 2: Αριθμητικές και Αναλυτικές Μέθοδοι για Ασυνεχή Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων</b> | <b>5</b>   |
| 2.1 Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation . . . . .                                        | 5          |
| 2.2 Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές . . . . .                                                | 6          |
| 2.3 Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι . . . . .                                 | 7          |
| 2.4 Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά . . . . .                                                   | 8          |
| <b>3 Δράση 3: Υλοποίηση σε Σύγχρονα Υπολογιστικά Περιβάλλοντα</b>                            | <b>9</b>   |
| 3.1 Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές . . . . .                                         | 9          |
| 3.2 Υλοποίηση σε FPGAs και Πολυπύρηντα Συστήματα (Multicores, Manycores) . . . . .           | 10         |
| <b>4 Δράση 4: Συγκερασμός και Επικύρωση</b>                                                  | <b>11</b>  |
| 4.1 Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού . . . . .                                 | 11         |
| 4.2 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής . . . . .                                 | 12         |
| 4.3 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής . . . . .                | 12         |
| <b>5 Δράση 6: Διάχυση Αποτελεσμάτων</b>                                                      | <b>13</b>  |
| 5.1 Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια . . . . .                                      | 13         |
| <b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑΤΑ</b>                                                                           | <b>14</b>  |
| <b>Α΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1</b>                                                   | <b>15</b>  |
| <b>Β΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2</b>                                                   | <b>45</b>  |
| <b>Γ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3</b>                                                   | <b>54</b>  |
| <b>Δ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4</b>                                                   | <b>64</b>  |
| <b>Ε΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1</b>                                                   | <b>87</b>  |
| <b>ΣΤ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2</b>                                                  | <b>98</b>  |
| <b>Ζ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1</b>                                                   | <b>111</b> |

|                                     |     |
|-------------------------------------|-----|
| Η΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 | 123 |
|-------------------------------------|-----|

|                                     |     |
|-------------------------------------|-----|
| Θ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3 | 143 |
|-------------------------------------|-----|

# 1 Δράση 1: Συντονισμός Έργου

## 1.1 Σκοπός

Σκοπός της παρούσας δράσης είναι η παρακολούθηση και ο συντονισμός του φυσικού και οικονομικού αντικειμένου του έργου ώστε να επιτευχθούν οι στόχοι όλων των δράσεων και να υλοποιηθεί το σύνολο των παραδοτέων. Για την επίτευξη των στόχων της παρούσας δράσης:

- Οργανώνονται ετήσιες ερευνητικές συναντήσεις όλων των συνεργατών του έργου με σκοπό την παρουσίαση της προόδου των ερευνητικών αποτελεσμάτων και τον προγραμματισμό των μελλοντικών ερευνητικών στόχων και ενεργειών
- Οργανώνονται εξαμηνιαίες συναντήσεις των συντονιστών και υπευθύνων των Κεντρικών Ερευνητικών Ομάδων (ΚΕΟ) με σκοπό την επίλυση οργανωτικών θεμάτων καθώς και την παρακολούθηση του οικονομικού αντικειμένου.
- Συντάσσονται ετήσιες εκθέσεις προόδου.

## 1.2 Δραστηριότητες Έτους 2012

Στις 21 Ιουλίου 2012, αμέσως μετά την έκδοση της Πράξης Ένταξης του έργου στις 26 Ιουνίου 2012, πραγματοποιήθηκε η εναρκτήρια <sup>1η</sup> συντονιστική και ερευνητική συνάντηση του έργου. Στην συνάντηση παρουσιάστηκαν θέματα διαχείρισης έργων ΕΣΠΑ από στελέχη του ΕΛΚΕ Πολυτεχνείου Κρήτης καθώς και περιγραφή των ερευνητικών στόχων όλων των δράσεων για το επόμενο χρονικό διάστημα από τους συντονιστές και μέλη των συνεργαζόμενων ΚΕΟ. Ο πίνακας που ακολουθεί συνοψίζει τις δραστηριότητες της δράσης και παραπέμπει (μέσω hyperlinks) στην ιστοσελίδα του έργου.

| ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΟΜΑΔΩΝ |                    |                   |              |
|--------------------------------|--------------------|-------------------|--------------|
| Α/Α                            | ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ   | ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ | ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ |
| 1η                             | Πολυτεχνείο Κρήτης | Ιούλιος 2012      | 10           |



Στιγμιότυπο από την εναρκτήρια συνάντηση του έργου (Ιούλιος 2012)

## 2 Δράση 2: Αριθμητικές και Αναλυτικές Μέθοδοι για Ασυνεχή Προβλήματα Πολλαπλών Πεδίων

Σκοπός της παρούσας δράσης, όπως αναφέρεται στο ΤΔΥ, είναι η ανάπτυξη και μελέτη αριθμητικών και αναλυτικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ), οι οποίες χαρακτηρίζονται από ασυνεχείς συντελεστές και αναφέρονται σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων. Η υλοποίησή της πραγματοποιείται από τέσσερις διαφορετικές δράσεις (2.1, 2.2, 2.3 και 2.4), ανάλογα με την κατηγορία μεθόδων επίλυσης που χρησιμοποιούνται, των οποίων η περιγραφή και η πρόοδος που επετεύχθη την τρέχουσα περίοδο ακολουθεί.

### 2.1 Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation

Σκοπός της δράσης 2.1 είναι η ανάπτυξη και μελέτη ορθογώνιων ή spline collocation μεθόδων για την επίλυση μη-κλασικών ΜΔΕ (multiphysics, multidomain) και η αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές, αλλά και η κατανόηση της επίδρασης των ασυνεχειών αυτών στην συμπεριφορά της μεθόδου collocation όσον αφορά τον βαθμό σύγκλισης και την ευστάθεια της μεθόδου, καθώς και της κατάστασης των αντίστοιχων γραμμικών συστημάτων. Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια δράσεων 3 και 4).

Την τρέχουσα περίοδο τα παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Εισάγονται για πρώτη φορά νέες συναρτήσεις βάσης τύπου Hermite ικανές να προσεγγίζουν και να προσομοιώνουν συνεχείς συναρτήσεις με *ασυνεχείς παραγώγους*. Τα νέα αυτά κυβικά ασυνεχή πολυώνυμα Hermite συνδυάζονται με την μέθοδο Collocation για την επίλυση μίας ΜΔΕ τύπου Διάχυσης-Αντίδρασης στις 1+1 (χρονική+χωρική) διαστάσεις, η οποία προσομοιώνει ένα μονοδιάστατο πρόβλημα διάχυσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου (μία πηγή κυττάρων / τρεις περιοχές φαιάς-λευκής-φαιάς ουσίας). Η Collocation συνδυάζεται με βασικές μεθόδους διακριτοποίησης του χρόνου (Backward Euler, Crank-Nikolson, Runge-Kutta) και η χωρική σύγκλιση που πιστοποιείται αριθμητικά δεν διαταράσσεται, δηλαδή παραμένει τετάρτης τάξεως.
- Μελετάται η αποδοτική επίλυση μεγάλων γραμμικών συστημάτων, τα οποία προκύπτουν από την εφαρμογή της μεθόδου Collocation για την διακριτοποίηση ελλειπτικών ΜΔΕ τύπου Helmholtz στις δύο χωρικές διαστάσεις, μέσω της απεικόνισης τους σε σύγχρονα πολυεπεξεργαστικά υπολογιστικά περιβάλλοντα τα οποία συνδυάζονται και με γραφικά υποσυστήματα (GPU) για την επιτάχυνση της απόδοσης των αριθμητικών πράξεων. Ο κατάλληλος μετασχηματισμός του πίνακα Collocation σε μορφή 2-κυκλική και η επιλογή της Schur-πρоруθμισμένης BiCGStab επαναληπτικής μεθόδου οδηγούν σε έναν παράλληλο αλγόριθμο ο οποίος απεικονίζεται αποδοτικά σε παράλληλες αρχιτεκτονικές σταθερού αριθμού επεξεργαστών. Η υλοποίηση του σε κοινής-μνήμης πολυεπεξεργαστικά συστήματα με GPUs οδηγούν σε βελτίωση του υπολογιστικού χρόνου έως και περίπου 30% .

Παράλληλα ολοκληρώνεται και παραδίδεται η Διδακτορική Διατριβή της Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη με τίτλο: *Η Μέθοδος Collocation για Παραβολικές Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις με Ασυνεχή Συντελεστή Διάχυσης: Στην Κατεύθυνση Προσομοίωσης Καρκινικών Όγκων Εγκεφάλου* (Επιβλέπων Καθ. Ι. Σαριδάκης).

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.1, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Α'.

## 2.2 Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές

Σκοπός της παρούσας δράσης, όπως αναφέρεται στο ΤΔΥ, είναι κυρίως η δημιουργία και μελέτη νέων προχωρημένων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή κατάλληλες για προβλήματα με σύνθετες ΜΔΕ και ιδιαίτερα κατάλληλες για την



αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές τους. Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια υποέργων 3 και 4).

Κατά τη διάρκεια του 2012 πραγματοποιήσαμε μια επισκόπηση των μεθοδολογιών προσομοίωσης MDMP προβλημάτων. Επίσης μελετήσαμε τα χαρακτηριστικά των εφαρμογών του έργου προκειμένου να βρεθούν κατάλληλες μέθοδοι για την αντιμετώπιση τους. Ξεκινήσαμε να μελετάμε τις ΜΧΔ και σε αυτές θα επικεντρωθούμε στη Δράση 2.2 στα επόμενα βήματα για να αντιμετωπίσουμε απλά προβλήματα MDMP αλλά και πιο πολύπλοκα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου. Συγκεκριμένα, θα μελετήσουμε περαιτέρω μεθοδολογίες για τη λύση ελλειπτικών και παραβολικών κατάλληλες για τα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής.

Την τρέχουσα περίοδο η κύρια ερευνητική δραστηριότητα συνοψίζεται ως εξής:

- Επισκόπηση των μεθοδολογιών προσομοίωσης MDMP προβλημάτων και μελέτη των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών των εφαρμογών του έργου.
- Μελέτη Μεθόδων Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ) για την αντιμετώπιση προβλημάτων μοντέλων και εφαρμογών.

Τεχνική περιγραφή της ερευνητικής δραστηριότητας περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.2, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Β'.

## 2.3 Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι

Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που θα αναπτυχθεί, στα πλαίσια της παρούσας δράσης, στοχεύει στην ανάπτυξη υβριδικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ οι οποίες θα αποτελούνται από τον συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo, για να καταστήσει το αρχικό σύνθετο πρόβλημα ΜΔΕ σε ένα σύνολο πλήρως ανεξάρτητων μεταξύ τους υπο-προβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων διαφορών) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων των υπο-προβλημάτων. Αισιοδοξούμε ότι θα μπορέσουμε να δημιουργήσουμε ένα γενικό πλαίσιο για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων (και όχι μόνον) αλλά και ένα πρακτικό εργαλείο για την προσομοίωσή τους. Η υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, διότι, πέρα από τον εγγενή παραλληλισμό των στοχαστικών μεθόδων, τα εν λόγω σχήματα έχουν διάφορα επιπρόσθετα ελκυστικά χαρακτηριστικά όσο αφορά την δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό

λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα (multithreading, cluster, web services, κ.λ.π.).

Βασικές δραστηριότητες την τρέχουσα περίοδο περιλαμβάνουν ανασκόπηση της περιοχής και των διαθέσιμων πακέτων λογισμικού καθώς και σχετική ενημέρωση των μελών υλοποίησης του έργου.

Τεχνική περιγραφή των δραστηριοτήτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.3, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Γ'.

## 2.4 Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά

Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που θα αναπτυχθεί, στα πλαίσια της παρούσας δράσης, στοχεύει στην μελέτη και προσαρμογή της καινοτόμου αυτής μαθηματικής μεθόδου μετασχηματισμού-Φωκά για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές. Στην διαδικασία αυτή περιλαμβάνεται η ανάπτυξη αναλυτικών ή αριθμητικών μεθόδων επίλυσης των γενικευμένων συνθηκών ή των αντίστοιχων Dirichlet-Neumann απεικονίσεων στην περίπτωση ασυνεχών συντελεστών καθώς και η ανάπτυξη λύσεων κλειστής μορφής ως προς τον χρόνο σε ευαίσθητα εξελικτικά προβλήματα αιχμής (π.χ. πρόβλημα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου) για την άμεση παραγωγή αποτελεσμάτων στον χρόνο χωρίς ενδιάμεσα χρονικά βήματα.

Την τρέχουσα περίοδο τα παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Ανάπτυξη νέου φορμαλισμού ώστε να επεκταθεί η μέθοδος Φωκά και να συμπεριλάβει γραμμικές ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης. Αντιμετωπίστηκαν με επιτυχία τα προβλήματα που παρουσιάζονται στις διεπαφές και κατέστη δυνατό να βρεθεί σε κλειστή μορφή η λύση ενός προβλήματος τριών χωρικών πεδίων σε  $1 + 1$  διαστάσεις.
- Προσαρμογή μεθόδου αριθμητικής ολοκλήρωσης σε υπερβολικές καμπύλες για την αποτελεσματική προσέγγιση των μιγαδικών/εκθετικών ολοκληρωμάτων που περιλαμβάνονται στην αναλυτική λύσης που παρήχθη με τη μέθοδο Φωκά.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 2.4, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Δ'.

### 3 Δράση 3: Υλοποίηση σε Σύγχρονα Υπολογιστικά Περιβάλλοντα

Σκοπός της παρούσας δράσης, όπως αναφέρεται στο ΤΔΥ, είναι η 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 υλοποίηση της πραγματοποιείται από δύο διαφορετικές δράσεις (3.1 και 3.2), ανάλογα με την κατηγορία αρχιτεκτονικών που χρησιμοποιούνται, των οποίων των οποίων η περιγραφή και η πρόοδος που επετεύχθη την τρέχουσα περίοδο ακολουθεί.

#### 3.1 Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές

Αντικείμενο της συγκεκριμένης δράσης αποτελεί η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε σύγχρονες παράλληλες αρχιτεκτονικές (Clusters, Grids και δυνητικά σε Clouds). Η υλοποίηση των μεθόδων σε Clusters αναφέρεται τόσο σε ομοιογενή, συμμετρικά σχήματα όπου θα 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. Επίσης κατά τις περιπτώσεις όπου για την εκτέλεση των προσομοιώσεων θα διατίθενται Clusters εξοπλισμένα με επεξεργαστές γραφικών (GPUs) πολλαπλών πυρήνων, το λογισμικό παράλληλης προσομοίωσης θα είναι σε θέση να καταναίμει μέρος του υπολογισμού στους επεξεργαστές γραφικών χρησιμοποιώντας κατάλληλες διεπαφές (CUDA, OpenCL). Σε επόμενο στάδιο, η εκτέλεση των προσομοιώσεων μεταφέρεται στο ευρύτερο περιβάλλον των διαδικτυακών πλεγμάτων (Grids), όπου περιλαμβάνονται περισσότερα του ενός Clusters, γεωγραφικά κατανομημένα και διασυνδεδεμένα μέσω διαδικτύου. Σε αυτό το στάδιο θα υλοποιηθούν τμήματα λογισμικού τα οποία θα δίνουν τη δυνατότητα κατά την προσομοίωση να γίνεται αποδοτική και ευέλικτη επιλογή υπολογιστικών πόρων, στόχος της οποίας θα είναι η περαιτέρω ελάττωση του χρόνου εκτέλεσης των υπό εξέταση αριθμητικών μεθόδων. Για το σκοπό αυτό θα γίνει ενσωμάτωση του λογισμικού που υλοποιήθηκε κατά το πρώτο μέρος της δράσης σε κατάλληλο λογισμικό συστημάτων Grid, μεταξύ των οποίων σημαντικότερα είναι τα περιβάλλοντα Globus και gLite. Τέλος, υπό την προϋπόθεση της ανάπτυξης

ώριμης υπολογιστικής υποδομής, τίθεται δυνητικά και η υλοποίηση της συγκεκριμένης δράσης στο επίπεδο των Clouds 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.

Την τρέχουσα περίοδο έγινε:

- Ανασκόπηση της διεθνούς βιβλιογραφίας και μελέτη των μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλού πεδίου (Multi Domain) προκειμένου τα μέλη της ΚΕΟ3 να αποκτήσουν το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο κατανόησης των αριθμητικών μεθόδων επίλυσης του προβλήματος, οι οποίες θα υλοποιηθούν στα παραπάνω περιβάλλοντα. Επίσης, μελετήθηκαν μαθηματικές μέθοδοι της Δράσης 2.
- Ανασκόπηση λογισμικού ανοικτού (ελεύθερου) κώδικα (Open Source) αφενός για γλώσσες προγραμματισμού για παράλληλη υλοποίηση και αφετέρου για πλατφόρμες λογισμικού, που διαθέτουν υλοποιημένα εργαλεία για επίλυση PDEs και άλλες αριθμητικές μεθόδους.

Τεχνική περιγραφή των δραστηριοτήτων της τρέχουσας περιόδου περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 3.1, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Ε'.

### 3.2 Υλοποίηση σε FPGAs και Πολυπύρηνια Συστήματα (Multicores, Manycores)

Ο σκοπός της Δράσης 3.2 είναι η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε αρχιτεκτονικές επεξεργασίας γραφικών (Graphics Processor Units, GPU) καθώς και σε επαναδιατασσόμενες (reconfigurable) αρχιτεκτονικές (πχ. Field Programmable Gate Arrays, FPGAs). Στόχος της μελέτης θα είναι να εκτιμηθεί η καταλληλότητα του κάθε πακέτου λογισμικού (συνολικά ή κατά τμήματά του) για εκτέλεση σε καθεμιά από τις πολυπύρηνες πλατφόρμες που θα επιλεγούν ως πειραματικές πλατφόρμες στο έργο, ή εναλλακτικά για επιτάχυνση με χρήση εξειδικευμένου κατά περίπτωση αναδιατασσόμενου υλικού. Με βάση τα αποτελέσματα της μελέτης θα μεταφερθούν και απεικονιστούν τα πακέτα λογισμικού – είτε καθολικά, είτε κατά τμήματα - στα κατάλληλα κατά περίπτωση πολυπύρηνια συστήματα. Επίσης θα κατασκευαστεί εξειδικευμένο υλικό για την επιτάχυνση συγκεκριμένων υπολογιστικών πυρήνων των εφαρμογών και το απαραίτητο λογισμικό για την επικοινωνία με τον υπολογιστή ξενιστή (Host computer).



Την τρέχουσα περίοδο γίνεται:

- Ανασκόπηση των βασικών επεξεργαστικών μονάδων που θα χρησιμοποιηθούν (GPUs, FPGAs, Heterogeneous Systems)
- Ανασκόπηση των μοντέλων προγραμματισμού που θα χρησιμοποιηθούν (CUDA, OpenCL, HDL)
- Συντάσσονται οι τεχνικές προδιαγραφές για την απόκτηση του απαραίτητου υλικού.

Τεχνική περιγραφή των δραστηριοτήτων της τρέχουσας περιόδου περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 3.2, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα ΣΤ'.

## 4 Δράση 4: Συγκερασμός και Επικύρωση

Ανάπτυξη πλατφόρμας λογισμικού για προβλήματα πολλαπλών πεδίων καθώς και επικύρωση της για την επίλυση προβλημάτων της Περιβαλλοντικής Μηχανικής και της Ιατρικής

### 4.1 Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί 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 θα ενσωματώνει μεθόδους και λογισμικό της Δράσης 2, θα επιτρέπει την εκμετάλλευση των σύγχρονων υπολογιστικών συστημάτων και θα διευκολύνει την αποδοτική χρήση των λογισμικών μονάδων. Η αρχιτεκτονική αυτή θα προσαρμοσθεί 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.

Κατά το έτος 2012 βασικός στόχος της παρούσας δράσης ήταν η επισκόπηση της υπάρχουσας κατάστασης σε ότι αφορά τις αρχιτεκτονικές ενδιαφέροντος του έργου, αλλά και ήδη υπάρχουσες πλατφόρμες επίλυσης προβλημάτων.



Τεχνική περιγραφή των δραστηριοτήτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.1, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Ζ'.

## 4.2 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής

Το πρόβλημα της εξέλιξης καρκινικών εγκεφαλικών όγκων είναι ένα εξαιρετικής κρισιμότητας πρόβλημα του οποίου η ιατρική αντιμετώπιση παρουσιάζει μεγάλες δυσκολίες. Τα μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν το πρόβλημα αυτό ανήκουν στην κατηγορία των ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές, λόγω ανομοιογένειας του εγκεφαλικού ιστού, και συνεπώς ανήκουν στην κατηγορία των σύνθετων ΜΔΕ που μελετώνται στο παρόν έργο. Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων) με ένα τόσο σημαντικό πρόβλημα, αφετέρου δε η μελέτη της εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, με χρήση νέων μεθόδων, λογισμικού και σύγχρονων υπολογιστικών αρχιτεκτονικών.

Την τρέχουσα περίοδο τα παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Επικύρωση των μεθόδων Collocation με ασυνεχή στοιχεία Hermite (dDHC) που αναπτύξαμε στη Δράση 2.1 σε προβλήματα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο στις 3 περιοχές (φαία - λευκή - φαία ουσία) με  $n$  πηγές στις  $1 + 1$  διαστάσεις. Επαληθεύσαμε την τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC.
- Επικύρωση των μεθόδων μετασχηματισμού Φωκά που αναπτύξαμε στη Δράση 2.4 σε προβλήματα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο στις 3 περιοχές (φαία - λευκή - φαία ουσία) με  $n$  πηγές στις  $1 + 1$  διαστάσεις.
- Αξιολόγηση πακέτων λογισμικού ανοικτού κώδικα σύγχρονων αριθμητικών μεθόδων, η επιλογή της πλατφόρμας πεπερασμένων στοιχείων FEniCS και η εγκατάστασή της στα υπολογιστικά συστήματα του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ (ΕΕΜΗΥ).

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.2, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Η'.

## 4.3 Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής

Το πρόβλημα της υφαλμύρισης (διείσδυση θαλασσινού ύδατος) υπόγειων υδροφορέων γλυκών υδάτων έχει αναδειχθεί σε ένα σημαντικής σπουδαιότητας οικολογικό πρόβλημα που απασχολεί τη χώρα, ιδιαίτερα δε τη νησιωτική. Τα

μαθηματικά μοντέλα που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν το πρόβλημα αυτό ανήκουν επίσης στην κατηγορία των ΜΔΕ με ασυνεχείς συντελεστές, λόγω ανομοιογένειας της υδραυλικής αγωγιμότητας του εδάφους, και συνεπώς ανήκουν στην κατηγορία των σύνθετων ΜΔΕ που μελετώνται στο παρόν έργο. Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων και λογισμικού) με ένα σημαντικό περιβαλλοντικό πρόβλημα, αφετέρου δε την ανάπτυξη λογισμικού για τη μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα με υψηλής ακρίβειας μεθόδους αλλά και αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

Την τρέχουσα περίοδο τα παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Μελέτη ενός αναλυτικού μοντέλου υπόγειου υδροφορέα ορθογώνιας γεωμετρίας, με ενιαία τιμή υδραυλικής αγωγιμότητας στο εσωτερικό του, ο οποίος προσεγγίζει τον υπόγειο υδροφορέα στο Βαθύ Καλύμνου.
- Μελέτη και ανάλυση της συμπεριφοράς του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX II για τον ανωτέρω υπόγειο υδροφορέα.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων περιλαμβάνεται στην Ετήσια Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.3, η οποία επισυνάπτεται στο Παράρτημα Θ'.

## 5 Δράση 6: Διάχυση Αποτελεσμάτων

Οι βασικές δραστηριότητες επίτευξης της διάχυσης των ερευνητικών αποτελεσμάτων του έργου περιλαμβάνονται στις εξής γενικές κατηγορίες:

- Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια.
- Διοργάνωση επιστημονικών ημερίδων.
- Ανάπτυξη ιστοσελίδας του έργου.
- Διοργάνωση ημερίδας παρουσίασης των αποτελεσμάτων του έργου.

### 5.1 Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια

Στο πλαίσιο διάχυσης των αποτελεσμάτων, την τρέχουσα χρονική περίοδο, παρουσιάσαμε επιστημονικές εργασίες σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια, που συνοψίζονται στον πίνακα που ακολουθεί.



| ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ |                       |              |              |         |
|------------------------------|-----------------------|--------------|--------------|---------|
| ΤΙΤΛΟΣ                       | ΤΟΠΟΘΕΣΙΑ             | ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ | ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ | ΒΡΑΒΕΙΑ |
| NUMAN 2012                   | Ιωάννινα<br>Sept 2012 | 3            | -            | -       |
| PDE Software Frameworks      | Münster<br>Jun 2012   | 1 (Poster)   | -            | -       |

## Παράρτημα Α' Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 2.1

Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation

## Περιεχόμενα

|                                                                                                     |           |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1 Σκοπός</b>                                                                                     | <b>3</b>  |
| 1.1 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων σε γραφικά υποσυστήματα GPUs . . . . . | 3         |
| <b>2 Μεθοδολογία</b>                                                                                | <b>4</b>  |
| 2.1 Red Black Collocation γραμμικά συστήματα . . . . .                                              | 4         |
| 2.1.1 Παράλληλος αλγόριθμος για τη μέθοδο Collocation . . . . .                                     | 9         |
| 2.2 Η ασυνεχής Collocation σε 3 περιοχές . . . . .                                                  | 16        |
| <b>3 Αριθμητικά Αποτελέσματα Υλοποιήσεων</b>                                                        | <b>23</b> |
| 3.1 Αποτελέσματα υλοποίησης σε ένα GPU Shared-memory υπολογιστικό σύστημα . . . . .                 | 23        |
| 3.1.1 Συμπεράσματα υλοποίησης . . . . .                                                             | 25        |
| 3.2 Η ασυνεχής Collocation σε 3 περιοχές . . . . .                                                  | 25        |
| <b>4 Παραδοτέα</b>                                                                                  | <b>26</b> |
| <b>5 Συνεργασίες</b>                                                                                | <b>26</b> |
| <b>6 Μελλοντικές Δράσεις</b>                                                                        | <b>26</b> |

# 1 Σκοπός

Σκοπός της παρούσας δράσης είναι η ανάπτυξη και μελέτη ορθογώνιων ή spline collocation μεθόδων για την επίλυση μη-κλασικών ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων (multiphysics, multidomain) και η αντιμετώπιση ασυνεχειών στους συντελεστές, αλλά και η κατανόηση της επίδρασης των ασυνεχειών αυτών στην συμπεριφορά της μεθόδου collocation όσον αφορά τον βαθμό σύγκλισης και την ευστάθεια της μεθόδου, καθώς και της κατάστασης των αντίστοιχων γραμμικών συστημάτων. Τα αριθμητικά σχήματα που θα αναπτυχθούν θα υλοποιηθούν σε σειριακά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και σύγχρονα παράλληλα για προβλήματα εφαρμογών (στα πλαίσια δράσεων 3 και 4). Την τρέχουσα περίοδο τα παραγόμενα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα αφορούν την:

- Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των εξισώσεων Hermite Collocation σε γραφικά υποσυστήματα υπολογισμών (GPUs),
- Εισαγωγή των ασυνεχών κυβικών Hermite πολυώνυμων και τη αντίστοιχη μέθοδο Collocation στις 1+1 διαστάσεις και 3 περιοχές ασυνέχειας,

και αναπτύσσονται στις παραγράφους που ακολουθούν.

## 1.1 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων σε γραφικά υποσυστήματα GPUs

Αντικείμενο αυτής της ερευνητικής δραστηριότητας είναι η κατασκευή και υλοποίηση παράλληλων αλγορίθμων της αριθμητικής μεθόδου collocation, ώστε να είναι εφικτή η επίλυση multiphysics, multidomain ρεαλιστικών προβλημάτων σε σύγχρονες αρχιτεκτονικές υπολογισμών. Η συνολική ερευνητική διαδικασία περιγράφηκε σε εργασία, η οποία υποβλήθηκε για παρουσίαση στο διεθνές συνέδριο World Congress on Engineering 2013, το οποίο θα διεξαχθεί στο Imperial College του Λονδίνου τον Ιούλιο του 2013.

Ειδικότερα σε αυτή την ερευνητική δραστηριότητα μελετάται η υπολογιστικά απαιτητική αριθμητική επίλυση του μεγάλου, αραιού και μη-συμμετρικού συστήματος εξισώσεων που προκύπτει από τη διακριτοποίηση ελλειπτικών Προβλημάτων Συνοριακών Τιμών (ΠΣΤ) σύμφωνα με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων Collocation χρησιμοποιώντας ως βάση τα πολυώνυμα Hermite bi-cubic. Ο τύπος του γραμμικού συστήματος μας υποδεικνύει τη χρήση παράλληλων επαναληπτικών μεθόδων για την αποδοτική επίλυσή του. Έτσι εξετάζεται η εφαρμογή της μη στατικής επαναληπτικής μεθόδου Bi-Conjugate Gradient Stabilized (BiCGSTAB) με προρρύθμιση, σε πολυεπεξεργαστικές παράλληλες αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης με την ταυτόχρονη χρήση γραφικών υποσυστημάτων (GPUs) για την επιπρόσθετη διεξαγωγή υπολογισμών. Για την αρτιότερη

υλοποίηση του όσο αφορά το υπολογιστικό κόστος των αριθμητικών διαδικασιών, κατασκευάζουμε τον Collocation πίνακα χρησιμοποιώντας μια διχρωματική αρίθμηση αγνώστων και εξισώσεων τύπου red-black, η οποία οδηγεί στην κατασκευή ενός καλά δομημένου επαναληπτικού παράλληλου αλγορίθμου. Η εφαρμογή της μεθόδου με την υλοποίηση του αλγορίθμου πραγματοποιήθηκε σε πολυεπεξεργαστικό μηχάνημα τύπου HP SL390 το οποίο διαθέτει γραφικά υποσυστήματα της κατηγορίας Tesla M2070. Οι μετρήσεις των χρόνων εκτέλεσης των υπολογισμών είναι ενδεικτικές της απόδοσης της παράλληλης αυτής υλοποίησης.

## 2 Μεθοδολογία

Η μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων Collocation είναι μια αριθμητική διαδικασία διακριτοποίησης υψηλής τάξης ακρίβειας για εφαρμογές που προκύπτουν από ΠΣΤ σε πολλούς τομείς της μηχανικής και της επιστήμης γενικότερα (π.χ. [11]). Η μέθοδος προσεγγίζει τη λύση του προβλήματος αποφεύγοντας τη χρήση διαδικασιών αριθμητικής ολοκλήρωσης παρέχοντας άμεσα τις προσεγγιστικές τιμές της συνάρτησης καθώς και της πρώτης τάξης παραγώγων της σε όλους τους κόμβους του πλέγματος διακριτοποίησης. Έτσι το παραγόμενο γραμμικό σύστημα είναι αραιάς μορφής, χωρίς σημαντικές ιδιότητες και μεγάλου μεγέθους, υποδεικνύοντας τη χρήση επαναληπτικών επιλυτών [27, 28, 21] για την αποδοτική προσέγγιση της λύσης του. Σε ρεαλιστικές εφαρμογές, όπου είναι αναγκαία η χρήση πολύ μικρής διακριτοποίησης, η αποδοτική υλοποίηση της μεθόδου απαιτεί τη διεξαγωγή των υπολογισμών σε υψηλής απόδοσης αρχιτεκτονικές. Σε ένα τέτοιο επιστημονικό υπολογιστικό περιβάλλον μπορούν να συνδυαστούν πολυεπεξεργαστικά μηχανήματα με μονάδες γραφικών υποσυστημάτων ( GPUs) για την επιτάχυνση της απόδοσης των αριθμητικών πράξεων. Η εκμετάλλευση των αυξημένων υπολογιστικών δυνατοτήτων των GPUs, απαιτεί την εφαρμογή ενός κατάλληλου, αποδοτικού παράλληλου αλγορίθμου για αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης.

Επιστημονικά ζητήματα τέτοιας μορφής προσέλκυαν το ενδιαφέρον ερευνητών στο παρελθόν και από τότε μέχρι σήμερα έχει πραγματοποιηθεί σημαντική πρόοδος στην παράλληλη επαναληπτική επίλυση με χρήση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων Collocation (π.χ. [8], [5], [12, 13, 14, 16]).

### 2.1 Red Black Collocation γραμμικά συστήματα

Ας επιλέξουμε το ΠΣΤ Modified Helmholtz ως πρόβλημα μοντέλο

$$\begin{cases} \nabla^2 u(x, y) - \lambda u(x, y) = f(x, y) , & (x, y) \in \Omega \\ u(x, y) = g(x, y) , & (x, y) \in \partial\Omega \end{cases} \quad (1)$$



με  $\lambda \geq 0$  στο ορθογώνιο χωρίο  $\Omega \equiv (0, 1) \times (0, 1)$  ως ένα πρόβλημα δοκιμής. Θεωρούμε ομοιόμορφη διαμέριση των διαστημάτων  $I^x = I^y = [0, 1]$  σε  $n_s$  υποδιαστήματα  $I_m^x = I_m^y$ ,  $m = 1, \dots, n_s$ , τα οποία παράγουν ένα ομοιόμορφα κατανεμημένο πλέγμα με βήμα διακριτοποίησης  $h = \frac{1}{n_s}$  και συντεταγμένες κόμβων τα σημεία  $(x_i, y_j)$ , όπου  $x_i = (i-1)h$  και  $y_j = (j-1)h$ ,  $i, j = 1, \dots, (n_s+1)$ . Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων Hermite Collocation θα παράξει μια προσεγγιστική λύση  $\tilde{u}(x, y)$  της μορφής

$$u(x, y) \sim \tilde{u}(x, y) = \sum_{i=1}^{\tilde{n}} \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \alpha_{i,j} \phi_i(x) \phi_j(y), \quad (2)$$

όπου  $\tilde{n} = 2(n_s+1)$ . Οι *συναρτήσεις βάσης*  $\phi_i(x)$  και  $\phi_j(y)$  είναι τα μονοδιάστατα, τμηματικά κυβικά πολυώνυμα Hermite [20]. Βασιζόμενος κάποιος στις ιδιότητες των συναρτήσεων βάσης Hermite, μπορεί εύκολα να επαληθεύσει ότι οι παρακάτω τέσσερις άγνωστοι

$$\begin{cases} a_{2i-1, 2j-1} &= \tilde{u}(x_i, y_j) \\ a_{2i-1, 2j} &= h \frac{\partial}{\partial y} \tilde{u}(x_i, y_j) \\ a_{2i, 2j-1} &= h \frac{\partial}{\partial x} \tilde{u}(x_i, y_j) \\ a_{2i, 2j} &= h^2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \tilde{u}(x_i, y_j) \end{cases} \quad (3)$$

αναφέρονται στο σημείο του πλέγματος  $(x_i, y_i)$ . Με την εισαγωγή των συνοριακών συνθηκών οι  $8n_s + 4$  στο πλήθος άγνωστοι, οι οποίοι σχετίζονται με κόμβους του συνόρου  $\partial\Omega$ , μπορούν να προσδιοριστούν εκ των προτέρων. Για το λόγο αυτό, οι collocation εξισώσεις που χρειάζονται για τον προσδιορισμό των υπολοίπων  $n = 4n_s^2$  αγνώστων κατασκευάζονται με την απαίτηση η προσέγγιση  $\tilde{u}(x, y)$  να ικανοποιεί το ΠΣΤ σε  $n$  εσωτερικά collocation σημεία. Αυτά είναι τα 4 σημεία Gauss για καθένα από τα  $n_s^2$  πεπερασμένα στοιχεία  $I_{ij}$ . Με δεδομένο ότι υπάρχει μια προς μια αντιστοιχία μεταξύ των σημείων αυτών και των εξισώσεων, η αρίθμηση των εξισώσεων θα προκύψει μόλις αριθμήσουμε αυτά τα collocation σημεία, ενώ η αρίθμηση των αγνώστων προκύπτει άμεσα μετά τον προσδιορισμό της αρίθμησης των αγνώστων για κάθε κόμβο. Η διαδικασία αυτή οδηγεί στη κατασκευή ενός γραμμικού συστήματος

$$Ax = b, \quad (4)$$

όπου  $A$  θα είναι ο  $n \times n$  Collocation πίνακας συντελεστών των αγνώστων και

$$x = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T \equiv [\alpha_{1,1} \ \dots \ \alpha_{\tilde{n}, \tilde{n}}]^T$$

θα είναι το διάνυσμα των αγνώστων διάστασης  $n = 4n_s^2$ .

Με στόχο την αύξηση των παράλληλων ιδιοτήτων του γραμμικού συστήματος, χρησιμοποιείται η διχρωματική αρίθμηση μορφής red-black (βλ. [12]) όπως

| Red     |       |       | Black |       |       | Red   |      |       | Black |       |  | Red |       |  |
|---------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|-------|-------|-------|--|-----|-------|--|
| ο ο 8   | ο 40  | ο 48  | ο 16  | ο 24  | ο 56  | ο 64  | ο ο  | ο 32  | ο ο   | ο 32  |  | ο ο | ο 32  |  |
| (8)     | (40)  | (48)  | (16)  | (24)  | (56)  | (64)  | (32) | (31)  |       |       |  |     |       |  |
| (7)     | (39)  | (47)  | (15)  | (23)  | (55)  | (63)  | (31) |       |       |       |  |     |       |  |
| ο ο 6 7 | 38 39 | 46 47 | 14 15 | 22 23 | 54 55 | 62 63 | ο ο  | 30 31 | ο ο   | 30 31 |  | ο ο | 30 31 |  |
| (6)     | (38)  | (46)  | (14)  | (22)  | (54)  | (62)  | (30) | (29)  |       |       |  |     |       |  |
| (5)     | (37)  | (45)  | (13)  | (21)  | (53)  | (61)  | (29) |       |       |       |  |     |       |  |
| ο ο 4 5 | 36 37 | 44 45 | 12 13 | 20 21 | 52 53 | 60 61 | ο ο  | 28 29 | ο ο   | 28 29 |  | ο ο | 28 29 |  |
| (4)     | (36)  | (44)  | (12)  | (20)  | (52)  | (60)  | (28) | (27)  |       |       |  |     |       |  |
| (3)     | (35)  | (43)  | (11)  | (19)  | (51)  | (59)  | (27) |       |       |       |  |     |       |  |
| ο ο 2 3 | 34 35 | 42 43 | 10 11 | 18 19 | 50 51 | 58 59 | ο ο  | 26 27 | ο ο   | 26 27 |  | ο ο | 26 27 |  |
| (2)     | (34)  | (42)  | (10)  | (18)  | (50)  | (58)  | (26) | (25)  |       |       |  |     |       |  |
| (1)     | (33)  | (41)  | (9)   | (17)  | (49)  | (57)  | (25) |       |       |       |  |     |       |  |
| ο ο ο 1 | ο 33  | ο 41  | ο 9   | ο 17  | ο 49  | ο 57  | ο ο  | ο 25  | ο ο   | ο 25  |  | ο ο | ο 25  |  |

Σχήμα 1: Red-Black αρίθμηση των collocation αγνώστων και εξισώσεων για  $n_s = 4$ .

απεικονίζεται στο Σχ. 1 για μέγεθος διακριτοποίησης  $n_s = 4$ . Οι μικροί σε μέγεθος αριθμοί απεικονίζουν την αρίθμηση των αγνώστων σε κάθε κόμβο, ενώ οι αριθμοί εντός κύκλων την αρίθμηση των εξισώσεων ανά πεπερασμένο στοιχείο. Οι μικροί κύκλοι στο σύνορο υποδεικνύουν την ύπαρξη αγνώστων που υπολογίστηκαν με χρήση των συνοριακών συνθηκών στη θέση αυτή. Στο Σχ. 2 παρουσιάζεται σχηματικά η δομή του παραγόμενου Collocation πίνακα μετά την εφαρμογή κατάλληλου μετασχηματισμού ομοιότητας [12, 13]. Εύκολα καταλήγει κανείς στο συμπέρασμα ότι ο Collocation πίνακας θα έχει τη παρακάτω μορφή

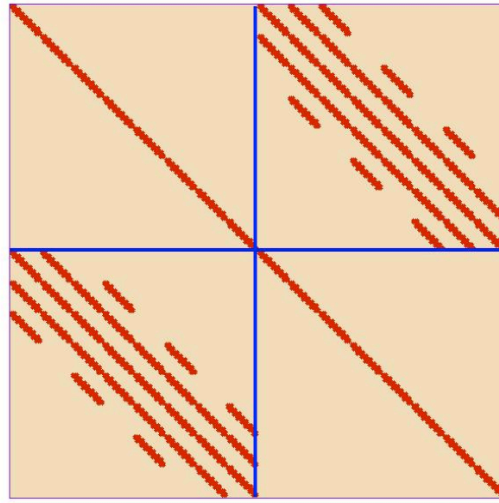
$$A = \begin{bmatrix} D_R & H_B \\ H_R & D_B \end{bmatrix}, \quad (5)$$

όπου  $D_R$  και  $D_B$  είναι αντιστρέψιμοι block διαγώνιοι πίνακες. Στην περίπτωση όπου  $n_s = 2p$  αυτοί θα έχουν τη μορφή

$$D_R = \text{diag}[\underbrace{A_2 \ 2A_1 \ 2A_2 \ \cdots \ 2A_1 \ 2A_2 \ -A_2}_{2p\text{-blocks}}], \quad (6)$$

$$D_B = 2 \text{ diag}[\underbrace{A_1 \ A_2 \ \cdots \ A_1 \ A_2}_{2p\text{-blocks}}] \quad (7)$$

$$H_R = \begin{bmatrix} R_1 & R_2 & & & \\ R_3 & R_1 & R_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & R_3 \\ & & & R_3 & R_1 & R_2 \\ & & & & R_3 & \hat{R}_1 \end{bmatrix} \quad (8)$$



Σχήμα 2: Η δομή του Collocation πίνακα για  $n_s = 4$ .

$$H_B = \begin{bmatrix} B_1 & B_2 & & & \\ B_3 & B_1 & B_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & B_3 & B_1 & B_2 \\ & & & B_3 & B_1 \end{bmatrix} \quad (9)$$

όπου

$$R_1 = \begin{bmatrix} A_4 & A_3 \\ -A_4 & A_3 \end{bmatrix}, \hat{R}_1 = \begin{bmatrix} A_4 & -A_4 \\ -A_4 & -A_4 \end{bmatrix},$$

$$R_2 = -\begin{bmatrix} A_4 & 0 \\ A_4 & 0 \end{bmatrix}, R_3 = \begin{bmatrix} 0 & A_3 \\ 0 & -A_3 \end{bmatrix},$$

και

$$B_1 = \begin{bmatrix} A_3 & -A_4 \\ A_3 & A_4 \end{bmatrix},$$

$$B_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ A_3 & -A_4 \end{bmatrix}, B_3 = -\begin{bmatrix} A_3 & A_4 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Η block μορφή των παραπάνω πινάκων εμπλέκει τέσσερις πενταδιαγώνιους βασικούς πίνακες  $A_i$  για  $i = 1, \dots, 4$ , διάστασης  $2n_s \times 2n_s$  [16].

Σε προηγούμενες εργασίες μας [13, 14, 15, 16] έχουμε παρουσιάσει την αποδοτική επίλυση του red-black collocation γραμμικού συστήματος, με χρήση της

επαναληπτικής μεθόδου SOR και επαναληπτικών μεθόδων υποχώρων Krylon, στηριζόμενοι στην ακόλουθη διάσπαση του πίνακα

$$A = D_A - L_A - U_A, \quad (10)$$

όπου

$$D_A = \begin{bmatrix} D_R & O \\ O & D_B \end{bmatrix}, \quad L_A = \begin{bmatrix} O & O \\ -H_R & O \end{bmatrix},$$

$$U_A = \begin{bmatrix} O & -H_B \\ O & O \end{bmatrix}, \quad (11)$$

και για τα υπόλοιπα μέρη του γραμμικού συστήματος υποθέσαμε την ανάλογη διαμέριση των διανυσμάτων  $x$  και  $b$  σε

$$x = \begin{bmatrix} x_R \\ x_B \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad b = \begin{bmatrix} b_R \\ b_B \end{bmatrix}. \quad (12)$$

Σε αυτές τις εργασίες, όπως επίσης και στην [5], η επαναληπτική μέθοδος BiCGSTAB, προρρυθμισμένη είτε με το Symmetric Gauss-Seidel (SGS) είτε από το Gauss-Seidel (GS) επαναληπτικό σχήμα, επιτύγχανε ταχύτερα σύγκλιση σε σχέση με τη κλασσική μέθοδο SOR ή από οποιαδήποτε άλλη τύπου Krylon επαναληπτική μέθοδο.

Με σκοπό τη μείωση του χρόνου επίλυσης, αλλά και την αύξηση του βαθμού παραλληλοποίησης της μεθόδου BiCGSTAB, θα εφαρμοστεί η παρακάτω προρρύθμιση

$$M_1^{-1} A M_2^{-1} M_2 x = M_1^{-1} b, \quad (13)$$

όπου  $M_1$  είναι ο επαναληπτικός πίνακας της μεθόδου Gauss Seidel, βασισμένος στη διάσπαση (10)

$$M_1 = D_A - L_A = D_A(I - D_A^{-1}L_A) \quad (14)$$

και

$$M_2 = I - D_A^{-1}U_A. \quad (15)$$

Οπότε το collocation γραμμικό σύστημα παίρνει τη παρακάτω μορφή

$$\begin{bmatrix} I & O \\ O & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_R + D_R^{-1}H_R x_B \\ x_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{b}_R \\ \hat{b}_B \end{bmatrix}, \quad (16)$$

όπου

$$S = D_B - H_R D_R^{-1} H_B \quad (17)$$

είναι το συμπλήρωμα του Schur του collocation πίνακα όσο αφορά τον πίνακα  $D_B$  και

$$\hat{b}_R = D_R^{-1} b_R \quad \text{και} \quad \hat{b}_B = b_B - H_R \hat{b}_R. \quad (18)$$

Ο ακόλουθος αλγόριθμος περιγράφει αναλυτικά τις διαδοχικές φάσεις υπολογισμών για την επίλυση του γραμμικού συστήματος :

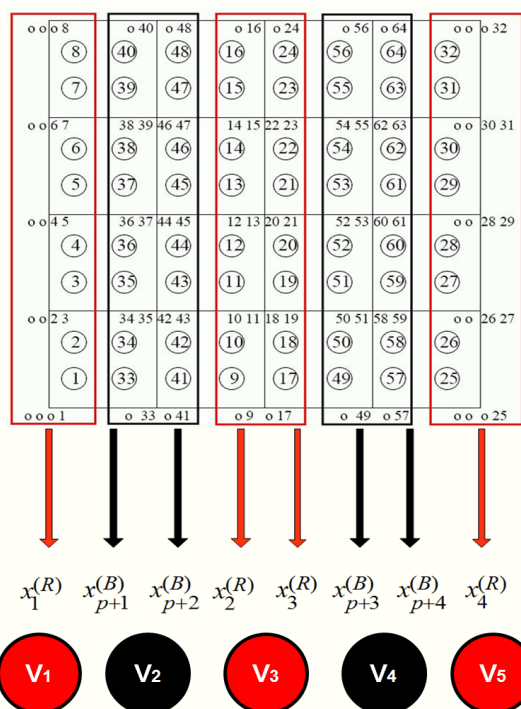
Αλγόριθμος για τις collocation εξισώσεις του συμπληρώματος Schur

- S1: Επίλυση  $D_R \hat{\mathbf{b}}_R = \mathbf{b}_R$   
 S2: Υπολογισμός  $\hat{\mathbf{b}}_B = \mathbf{b}_B - H_R \hat{\mathbf{b}}_R$   
 S3: Επίλυση με BiCGSTAB  $S \mathbf{x}_B = \hat{\mathbf{b}}_B$   
 S4: Υπολογισμός  $\hat{\mathbf{x}}_B = H_B \mathbf{x}_B$   
 S5: Επίλυση  $D_R \hat{\mathbf{x}}_R = \hat{\mathbf{x}}_B$   
 S6: Υπολογισμός  $\mathbf{x}_R = \hat{\mathbf{b}}_R - \hat{\mathbf{x}}_R$

Είναι προφανές ότι ο πολλαπλασιασμός πίνακα με διάνυσμα, με τους block διαγώνιους πίνακες  $D_R$ ,  $D_B$ ,  $H_B$  και  $H_R$ , είναι η διεργασία που κυριαρχεί στον αλγόριθμο, ακολουθούμενη από την άμεση επίλυση των γραμμικών συστημάτων που εμπλέκουν τους πίνακες  $D_R$  και  $D_B$ . Οι παραπάνω διεργασίες, στους *red* και *black* κύκλους υπολογισμών, απαιτούν τον σχεδιασμό αποδοτικών αλγορίθμων για υπολογιστικές αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης.

### 2.1.1 Παράλληλος αλγόριθμος για τη μέθοδο Collocation

Η αρχιτεκτονική του διαθέσιμου παράλληλου μηχανήματος και ο αριθμός των επεξεργαστών του, είναι οι σημαντικότεροι παράγοντες που λαμβάνονται υπ' όψη στο σχεδιασμό και την οργάνωση των υπολογισμών ενός παράλληλου αλγορίθμου. Το υπολογιστικό σύστημα στο οποίο πραγματοποιήθηκαν οι δοκιμές, είναι κοινής μνήμης, αποτελούμενο από λίγους σε πλήθος αλλά ισχυρούς επεξεργαστικούς πυρήνες. Αντίθετα το γραφικό υποσύστημα GPU διαθέτει μερικές εκατοντάδες υπολογιστικών πυρήνων με δυνατότητα εκτέλεσης βασικών αριθμητικών πράξεων. Οι υπολογιστικοί αυτοί πυρήνες έχουν τη δική τους μνήμη κι έτσι θα πρέπει να ληφθεί υπ' όψη η συγκεκριμένη αρχιτεκτονική στο διαχωρισμό δεδομένων και υπολογισμών, ενώ ταυτόχρονα όλοι οι πυρήνες να είναι απασχολημένοι κατά τη διάρκεια των υπολογισμών. Αυτό το *no idle core* υπολογιστικό μοντέλο απαιτεί ισοκατανομή και ισορροπία μεταξύ φόρτου επικοινωνίας και υπολογισμών. Ένας αποδοτικός τρόπος εκτέλεσης αυτής της απαιτητικής διαδικασίας, δηλαδή της ανάθεσης των υπολογιστικών νημάτων ( threads) σε κατάλληλους υπολογιστικούς πυρήνες, είναι να θεωρηθεί αρχικά μια εικονική αρχιτεκτονική με απεριόριστο αριθμό επεξεργαστών. Λαμβάνοντας υπ' όψη την αναγκαιότητα να έχουν τα threads ανεξάρτητα, μεταξύ τους, δεδομένα με κατά το δυνατόν ελαχιστοποίηση του κόστους επικοινωνίας με τη μνήμη, και ότι ο



Σχήμα 3: Αντιστοίχιση των collocation αγνώστων σε threads για  $n_s = 4$ .

αριθμός των υποδιαστημάτων  $n_s = 2p$  της διακριτοποίησης και προς τις δύο κατευθύνσεις  $x$  και  $y$  είναι άρτιος, γίνεται αντιληπτό ότι η κατάλληλη κατανομή επιτυγχάνεται με τη αντιστοίχιση ενός thread για κάθε μια από τις  $2p + 1$  κάθετες γραμμές του πλέγματος διακριτοποίησης. Αυτό παρουσιάζεται σχηματικά στο Σχ.3 για τη περίπτωση  $n_s = 4$  πεπερασμένων στοιχείων σε κάθε κατεύθυνση.

Επιπλέον, τα περιττής αρίθμησης threads αντιστοιχούν σε red κάθετες γραμμές πλέγματος, ενώ τα άρτια threads αντιπροσωπεύουν υπολογισμούς των black γραμμών πλέγματος. Εξαιτίας της  $2p$ -block διαμέρισης όλων των διανυσμάτων στους υπολογισμούς, είναι ξεκάθαρο ότι σε καθένα από τα περιττα threads  $V_{2i-1}$ ,  $i = 1, \dots, p + 1$ , έχει ανατεθεί ο υπολογισμός των διανυσμάτων  $t_{2i-2}$  και  $t_{2i-1}$  της λύσης, ενώ κάθε άρτιο thread  $V_{2i}$ ,  $i = 1, \dots, p$ , θα πρέπει να υπολογίσει τα διανύσματα  $t_{2p+2i-1}$  και  $t_{2p+2i}$  της λύσης. Η ιδιαιτερότητα που παρουσιάζεται στα thread  $V_1$  και  $V_{2p+1}$  οφείλεται στις συνοριακές συνθήκες.

Στον παράλληλο αλγόριθμο, όλες οι βασικές πράξεις διανυσμάτων γραμμικής άλγεβρας όπως εσωτερικά γινόμενα, πρόσθεση διανυσμάτων και πολλαπλασιασμοί τους με βαθμωτά μεγέθη, μπορούν να εκτελεστούν παράλληλα, βάσει της παραπάνω  $2p$ -block διαμέρισης όλων των διανυσμάτων. Ο λόγος που μπορούν να εκτελεστούν παράλληλα οι παραπάνω διαδικασίες είναι η ανεξαρτησία μεταξύ

των δεδομένων που έχει το κάθε thread.

Σύμφωνα με τον παραπάνω τρόπο αντιστοίχισης δεδομένων σε threads, οι παράλληλες διαδικασίες είναι ανεξάρτητες ως προς τα δεδομένα για όλους τους πολλαπλασιασμούς πίνακα με διάνυσμα και για τις πράξεις άμεσης επίλυσης κατά τους red και black κύκλους υπολογισμών. Οι παρακάτω παράλληλοι αλγόριθμοι ενσωματώνουν όλες τις παραπάνω ιδιότητες για τον υπολογισμό ενός τυχαίου διανύσματος  $t$  διάστασης  $4n_s^2$ .

|                                                                                                                                                                                                |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>Red Computation Cycle</p> <pre> C\$ OMP PARALLEL DO DEFAULT(SHARED) do i = 0 to p   <math>V_{2i+1}</math> computes <math>t_{2i}, t_{2i+1}</math> enddo C\$ OMP END PARALLEL DO </pre>       |
| <p>Black Computation Cycle</p> <pre> C\$ OMP PARALLEL DO DEFAULT(SHARED) do i = 1 to p   <math>V_{2i}</math> computes <math>t_{2p+2i}, t_{2p+2i-1}</math> enddo C\$ OMP END PARALLEL DO </pre> |

Η υλοποίηση των παραπάνω αλγορίθμων με CPU threads μπορεί να πραγματοποιηθεί με χρήση αποδοτικών διαδικασιών από υπάρχουσες αριθμητικές βιβλιοθήκες [10]. Για παράδειγμα, στην περίπτωση της εμπρός και πίσω αντικατάστασης κατά τη διάρκεια της block άμεσης επίλυσης του γραμμικού συστήματος με τους πίνακες  $D_R$  και  $D_B$ , μπορεί να επιλεγεί η κατάλληλη διαδικασία από την βιβλιοθήκη Lapack, ενώ για τον πολλαπλασιασμό πίνακα με διάνυσμα, που εμπλέκει τους πίνακες  $H_B$  και  $H_R$ , μπορεί να χρησιμοποιηθεί η κατάλληλη διαδικασία από τη βιβλιοθήκη BLAS. Ωστόσο, για την υλοποίηση με GPU threads κρίνεται αναγκαία η σχεδίαση κατάλληλων αλγορίθμων, έτσι ώστε να είναι εφικτή η εκμετάλλευση της ιδιαίτερης δομής των πινάκων που εμπλέκονται στους υπολογισμούς.

Η σειριακότητα των υπολογισμών κατά τη διάρκεια της εμπρός και πίσω αντικατάστασης στη φάση επίλυσης του γραμμικού συστήματος, σε συνδυασμό με τους περιορισμούς που υπάρχουν λόγω μεγέθους μνήμης των GPUs, άμεσα μας υποδεικνύει ότι οι επιλύσεις κατά τους red και black κύκλους υπολογισμών, με τους πίνακες συντελεστών  $D_R$  και  $D_B$  αντίστοιχα, πρέπει να εκτελεστούν από CPU threads.

Από την άλλη πλευρά η ανεξαρτησία των δεδομένων που εμπλέκονται στις βασικές πράξεις μεταξύ πινάκων και διανυσμάτων, σε συνδυασμό με το γεγονός ότι οι εκατοντάδες υπολογιστικοί πυρήνες των GPUs είναι οργανωμένοι σε

υπολογιστικές ομάδες και, μέσω της εκτέλεσης εφαρμογών κατά SIMD, μπορούν εκτελέσουν ταυτόχρονα βασικές αριθμητικές πράξεις ταχύτερα από ότι οι πυρήνες του κεντρικού επεξεργαστή του μηχανήματος. Κατά συνέπεια, κρίνεται κατάλληλη η εκτέλεση των διαδικασιών που εμπλέκουν πολλαπλασιασμό πίνακα-διανύσματος κατά τη διάρκεια των red και black κύκλων, με τους block πίνακες  $H_R$  και  $H_B$ , στη GPU. Περαιτέρω βελτίωση της απόδοσης μπορεί να επιτευχθεί με την εκμετάλλευση της block δομής των  $H_R$  και  $H_B$ , από τις σχέσεις (8) και (9) αντίστοιχα, επειδή εμπλέκονται αποκλειστικά δύο πενταδιαγώνιοι πίνακες  $A_3$  και  $A_4$  τάξης  $2n_s$ .

Ο παρακάτω αλγόριθμος περιγράφει λεπτομερώς ένα black κύκλο υπολογισμών του  $t = H_B z$  πολλαπλασιασμού πίνακα-διανύσματος στη GPU.

```

Black GPU Cycle
!$ACC DATA COPYIN(z) CREATE(temp) COPYOUT(t)
!$ACC KERNELS
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do k = 1 to n_s - 3 with step 2
    k_1 = (k - 1)2n_s , k_2 = k2n_s
    k_3 = (k + 1)2n_s , k_4 = (k + 2)2n_s
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do i = 1 to 2n_s
      t(k_2 + i) = A_3(3, i)z(k_1 + i) + A_4(3, i)z(k_2 + i)
    enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do i = 2 to 2n_s
      t(k_2 + i - 1) = t(k_2 + i - 1) +
        A_3(2, i)z(k_1 + i - 1) + A_4(2, i)z(k_2 + i)
    enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do i = 1 to 2n_s - 1
      t(k_2 + i + 1) = t(k_2 + i + 1) +
        A_3(4, i)z(k_1 + i) + A_4(4, i)z(k_2 + i)
    enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do i = 1 to 2n_s - 2
      t(k_2 + i) = t(k_2 + i) +
        A_3(1, i + 2)z(k_1 + i + 2) +
        A_4(1, i + 2)z(k_2 + i + 2)
    enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
    do i = 1 to 2n_s - 2
      t(k_2 + i + 2) = t(k_2 + i + 2) +
        A_3(5, i)z(k_1 + i) + A_4(5, i)z(k_2 + i)
    enddo
  enddo

```



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ  
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Πρόγραμμα για την ανάπτυξη  
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

```

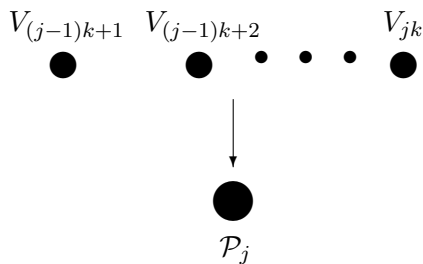
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s$ 
     $t(k_3 + i) = A_3(3, i)z(k_3 + i) - A_4(3, i)z(k_4 + i)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 2$  to    $2n_s$ 
     $t(k_3 + i - 1) = t(k_3 + i - 1) +$ 
       $A_3(2, i)z(k_3 + i - 1) - A_4(2, i)z(k_4 + i)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s - 1$ 
     $t(k_3 + i + 1) = t(k_3 + i + 1) +$ 
       $A_3(4, i)z(k_3 + i) - A_4(4, i)z(k_4 + i)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s - 2$ 
     $t(k_3 + i) = t(k_3 + i) +$ 
       $A_3(1, i + 2)z(k_3 + i + 2) -$ 
       $A_4(1, i + 2)z(k_4 + i + 2)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s - 2$ 
     $t(k_3 + i + 2) = t(k_3 + i + 2) +$ 
       $A_3(5, i)z(k_3 + i) - A_4(5, i)z(k_4 + i)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s$ 
     $temp(i) = t(k_3 + i)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s$ 
     $t(k_3 + i) = t(k_3 + i) - t(k_2 + i)$ 
  enddo
!$ACC LOOP INDEPENDENT
  do    $i = 1$  to    $2n_s$ 
     $t(k_2 + i) = t(k_2 + i) + temp(i)$ 
  enddo
enddo
!$ACC END KERNELS
!$ACC END DATA

```

Σημειώνεται ότι το τμήμα του αλγορίθμου που αφορά τη κατασκευή του πρώτου και του τελευταίου block γραμμών του πίνακα  $H_B$  δεν συμπεριλαμβάνεται, αλλά έχει παρόμοια μορφή. Η πραγματοποίηση των υπολογισμών του αντίστοιχου red κύκλου για GPU μπορεί να περιγραφεί με παρόμοιο αλγόριθμο.

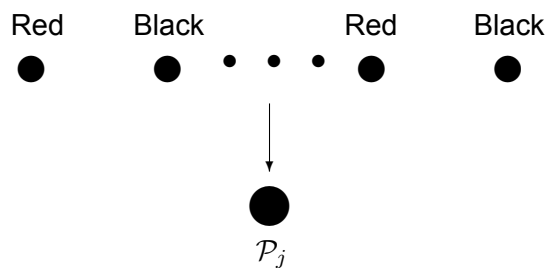
### Απεικόνιση υπολογισμών σε αρχιτεκτονικές σταθερής διάστασης

Για την εκτέλεση του αλγορίθμου σε ένα παράλληλο υπολογιστικό σύστημα, αποτελούμενου από  $P$  πυρήνες, ομάδες των threads πρέπει να αντιστοιχούν σε πυρήνες της GPU και σε αυτούς του κεντρικού επεξεργαστή. Αυτή η ενότητα περιγράφει τη διαδικασία αντιστοίχισης για τη περίπτωση όπου  $n_s = kP$ , καθώς για τις υπόλοιπες περιπτώσεις υπάρχει όμοια αντιμετώπιση. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, ωστόσο, το υπολογιστικό κόστος είναι το ίδιο για όλους τους πυρήνες υπολογισμών. Σύμφωνα με τον τρόπο αντιστοίχισης που ακολουθήθηκε ως τώρα, κάθε  $k$  διαδοχικά threads αντιστοιχίζονται σε κάθε έναν από τους  $\mathcal{P}_j$ , ( $j = 1, \dots, P$ ) πυρήνες, με βάση την αρχιτεκτονική του συστήματος.



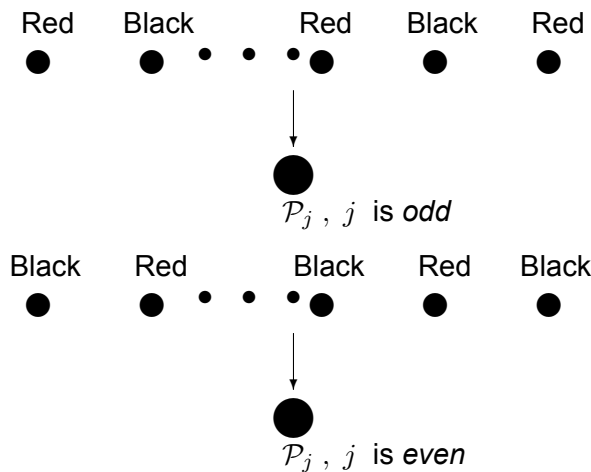
Οπότε γίνεται σαφές, ακολουθώντας την παραπάνω διαδικασία, ότι σε κάθε  $\mathcal{P}_j$  πυρήνα μπορούμε να αντιστοιχίσουμε  $k$  threads  $V_{(j-1)k+1}, \dots, V_{jk}$ . Παρατηρούμε ότι:

- Όταν το  $k$  είναι *άρτιος* οι δείκτες  $(j-1)k+1$  και  $jk$  που ικανοποιούν τη συνθήκη  $(j-1)k+1$  είναι *περιττοί*, ενώ οι  $jk$  είναι *άρτιοι*. Οπότε τα υπολογιστικά threads  $V_{(j-1)k+1}$  και  $V_{jk}$  είναι αντίστοιχα *red* (περιττά) και *black* (άρτια) threads κι έτσι σχηματικά θα ισχύει ότι:



Οπότε, στους πυρήνες  $\mathcal{P}_j$  αντιστοιχίζονται τα  $k$  *red* διανύσματα  $t_l$ ,  $l = (j-1)k, \dots, jk-1$  και τα  $k$  *black* διανύσματα  $t_{2p+l}$ ,  $l = (j-1)k+1, \dots, jk$ .

- Όταν ο δείκτης  $k$  είναι *περιττός* οι δείκτες  $(j-1)k+1$  και  $jk$  που ικανοποιούν τη συνθήκη  $(j-1)k+1$  και  $jk$  είναι *περιττοί* όταν  $j$  είναι *περιττός*, ενώ οι  $(j-1)k+1$  και  $jk$  είναι *άρτιοι* όταν το  $j$  είναι *άρτιος*. Έτσι τα threads  $V_{(j-1)k+1}$  και  $V_{jk}$  είναι μαζί *red* (περιττά) όταν το  $j$  είναι *περιττός* ενώ και τα δυο είναι *black* (άρτια) όταν το  $j$  είναι *άρτιος* κι έτσι θα έχουμε το σχήμα:



Οπότε, όταν το  $j$  είναι *περιττός*, στους πυρήνες  $\mathcal{P}_j$  αντιστοιχίζονται τα  $k+1$  *red* διανύσματα  $t_l$ ,  $l = (j-1)k, \dots, jk$  και τα  $k-1$  *black* διανύσματα  $t_{2p+l}$ ,  $l = (j-1)k+1, \dots, jk-1$ , ενώ, όταν το  $j$  είναι *άρτιος*, στους πυρήνες  $\mathcal{P}_j$  αντιστοιχίζονται τα  $k-1$  *red* διανύσματα  $t_l$ ,  $l = (j-1)k+1, \dots, jk-1$  και τα  $k+1$  *black* διανύσματα  $t_{2p+l}$ ,  $l = (j-1)k, \dots, jk$ .

Όλα τα παραπάνω μπορούν να περιγραφούν με τον παρακάτω παράλληλο αλγόριθμο για τον υπολογισμό κάθε επαναληπτικού βήματος του Schur complement:

Παράλληλος αλγόριθμος για Schur comp. collocation εξισώσεις

- S1: Solve in parallel on host  $D_R \hat{\mathbf{b}}_R = \mathbf{b}_R$
- S2: Send matrices  $A_3$  and  $A_4$  to GPU
- S3: Evaluate in parallel on GPU  $\hat{\mathbf{b}}_B = \mathbf{b}_B - H_R \hat{\mathbf{b}}_R$
- S4: Solve in parallel with BiCGSTAB  $S \mathbf{x}_B = \hat{\mathbf{b}}_B$
- S5: Evaluate in parallel on GPU  $\hat{\mathbf{x}}_B = H_B \mathbf{x}_B$
- S6: Solve in parallel on host  $D_R \hat{\mathbf{x}}_R = \hat{\mathbf{x}}_B$
- S7: Evaluate in parallel on host  $\mathbf{x}_R = \hat{\mathbf{b}}_R - \hat{\mathbf{x}}_R$

Οι υπολογισμοί του βήματος S4 της μεθόδου BiCGSTAB πραγματοποιούνται από τους επεξεργαστές του υπολογιστικού συστήματος εκτός από τους υπολογισμούς των δυο πολλαπλασιασμών πινάκων-διανυσμάτων σε κάθε επαναληπτικό βήμα όπου εμπλέκεται ο Schur complement πίνακας  $S$ . Πιο αναλυτικά, οι υπολογισμοί του βήματος S4, που εμπλέκουν τους πίνακες  $H_R$  και  $H_B$  ως πολλαπλασιαστές, θα διεξάγονται στη GPU σύμφωνα με τον ακόλουθο αλγόριθμο:

Υπολογισμός του  $t = Sp$

S1: Send  $p$  from host to GPU

S2: Evaluate in parallel on GPU  $t = H_B p$

S3: Send  $t$  from GPU to host

S4: Solve in parallel on host  $D_R s = t$

S5: Send  $s$  from host to GPU

S6: Evaluate in parallel on GPU  $q = H_R s$

S7: Send  $q$  from GPU to host

S8: Evaluate in parallel on host  $t = D_B p - q$

Το κόστος επικοινωνίας για τη μεταφορά δεδομένων μεταξύ της κύριας μνήμης του υπολογιστικού συστήματος και του γραφικού υποσυστήματος είναι αυτό της μεταφοράς δυο διανυσμάτων μεγέθους  $2n_s^2$  ανά κατεύθυνση. Δηλαδή, το κόστος επικοινωνίας κάθε επαναληπτικού βήματος της BiCGSTAB είναι το κόστος μεταφοράς οκτώ διανυσμάτων μεγέθους  $2n_s^2$  προς κάθε κατεύθυνση, αφού οι πίνακες  $A_3$  και  $A_4$  θα μεταφερθούν και θα αποθηκευτούν στη μνήμη της GPU κατά την έναρξη της διαδικασίας επίλυσης μία και μόνο φορά.

## 2.2 Η ασυνεχής Collocation σε 3 περιοχές

Ορμώμενοι από το μοντέλο διάχυσης καρικινικών όγκων στον εγκέφαλο (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράση 4.2 Έτος 2012 και σχετικές αναφορές), αναπτύξαμε [18]-[19] την ασυνεχή μέθοδο Hermite Collocation (dDHC) για το αδιάστατο μοντέλο της μορφής:

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ c_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (19)$$

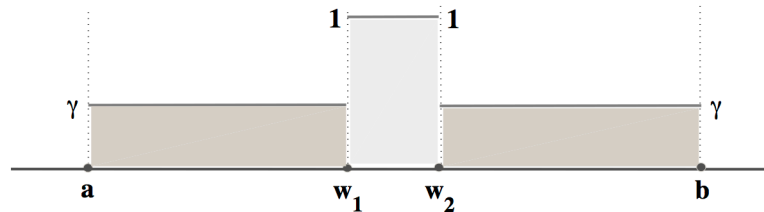
ή, ισοδύναμα, αντικαθιστώντας  $c(x, t) = e^t u(x, t)$ , της μορφής:

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (20)$$

Χαρακτηριστική ιδιότητα στην εξίσωση του ανωτέρου μοντέλου είναι ο ασυνεχής

συντελεστής διάχυσης  $D = D(x)$  της μορφής:

$$D(x) = \begin{cases} \gamma & , \quad a \leq x < w_1 \\ 1 & , \quad w_1 \leq x < w_2 \\ \gamma & , \quad w_2 \leq x \leq b \end{cases} \quad (21)$$



με  $\gamma < 1$  να είναι η αδιάστατη σταθερά διάχυσης. Επίσης, προς χάριν γενικότητας, θεωρούμε ότι η συνάρτηση  $f(x)$ , που χαρακτηρίζει την αρχική συνθήκη, είναι μία τυχαία συνεχής συνάρτηση.

Η παραβολική φύση της διαφορικής συνεπάγεται την συνέχεια της  $u$ , καθώς και των  $u_t$ ,  $(Du_x)$ . Και, καθώς ο συντελεστής  $D$  είναι ασυνεχής, η  $u_x$  πρέπει να είναι επίσης κατάλληλα ασυνεχής, ώστε να προκύπτει συνέχεια της  $(Du_x)$ . Επομένως, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι

$$[u] := u^+ - u^- = 0 \quad , \quad \text{για } x = w_k, \quad k = 1, 2 \quad , \quad (22)$$

$$u^+ := \lim_{x \rightarrow w_k^+} u(x) \quad \text{και} \quad u^- := \lim_{x \rightarrow w_k^-} u(x) \quad ,$$

$$[Du_x] := D^+ u_x^+ - D^- u_x^- = 0 \quad , \quad \text{για } x = w_k, \quad k = 1, 2 \quad . \quad (23)$$

Οπότε χρησιμοποιώντας τους παραπάνω περιορισμούς συνέχειας στα σημεία διασύνδεσης το μοντέλο καταλήγει στην παρακάτω μορφή :

$$\begin{cases} u_t = Du_{xx} \quad , \quad x \in \mathcal{R}_\ell \quad , \quad \ell = 1, 2, 3 \quad , \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \\ [u] = 0 \quad \text{και} \quad [Du_x] = 0 \quad \text{για } x = w_k \quad , \quad k = 1, 2 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (24)$$

με  $\mathcal{R}_\ell$  να δηλώνει την κάθε περιοχή

$$\mathcal{R}_1 := [a, w_1) \quad , \quad \mathcal{R}_2 := (w_1, w_2) \quad , \quad \mathcal{R}_3 := (w_2, b] \quad . \quad (25)$$

Μεταξύ άλλων προκαταρτικών μεθόδων που αναπτύξαμε (βλ. [19] και τις σχετικές αναφορές) για να αντιμετωπίσουμε τις ασυνεχείς στα σημεία διεπαφής, εισαγάγαμε και την νέα ασυνεχή μέθοδο Hermite Collocation (derivative Discontinuous Hermite Collocation - dDHC). Για μία σύντομη περιγραφή αλλά και για να αναπτύξουμε τον απαιτούμενο φορμαλισμό, ας θεωρήσουμε κατ' αρχήν για κάθε περιοχή  $\mathcal{R}_\ell$  ένα ομοιόμορφο πλέγμα  $t \times \mathcal{R}_\ell(\epsilon)$  που οι πλευρές είναι παράλληλες στους άξονες  $x$  και  $t$  και το βήμα διακριτοποίησης είναι  $h_\ell$  και  $\tau$  στην  $x$  και  $t$  κατεύθυνση αντίστοιχα. Συγκεκριμένα

$$\begin{cases} h_1 := (w_1 - a)/N_1, \\ h_2 := (w_2 - w_1)/N_2, \\ h_3 := (b - w_2)/N_3, \end{cases} \quad (26)$$

όπου  $N_\ell$  δηλώνει τον αριθμό των υποδιαστημάτων της κάθε περιοχής  $\mathcal{R}_\ell(\epsilon)$  αντίστοιχα, καθώς και οι συντεταγμένες των κόμβων  $(x_{\ell,m_\ell}, t_n)$  δίνονται από τις σχέσεις :

$$\begin{cases} x_{1,m_1} := a + m_1 h_1, & m_1 = 0, \dots, N_1 \\ x_{2,m_2} := w_1 + m_2 h_2, & m_2 = 0, \dots, N_2 \\ x_{3,m_3} := w_2 + m_3 h_3, & m_3 = 0, \dots, N_3 \end{cases} \quad (27)$$

και

$$t_n = n\tau, \quad n = 0, 1, \dots \quad (28)$$

Για ομαλές λύσεις  $u$  της διαφορικής εξίσωσης (24) σε κάθε υποδιάστημα  $\mathcal{R}_\ell(\epsilon)$ ,  $\ell = 1, 2, 3$  η προσεγγιστική λύση  $U_\ell(x, t)$  χρησιμοποιώντας πεπερασμένα στοιχεία με συναρτήσεις βάσης τα πολυώνυμα Hermite θα είναι της μορφής:

$$U_\ell(x, t) = \sum_{j_\ell=1}^{N_\ell+1} [\alpha_{\ell,2j_\ell-1}(t)\phi_{\ell,2j_\ell-1}(x) + \alpha_{\ell,2j_\ell}(t)\phi_{\ell,2j_\ell}(x)] \quad (29)$$

όπου  $\phi_{\ell,2j_\ell-1}(x)$  και  $\phi_{\ell,2j_\ell}(x)$  είναι τα Hermite κυβικά πολυώνυμα.

Σε κάθε κόμβο  $x_{\ell,j_\ell-1}$  ορίζονται δύο κυβικά πολυώνυμα Hermite :

$$\phi_{\ell,2j_\ell-1}(x) = \begin{cases} \phi\left(\frac{x_{\ell,j_\ell-1}-x}{h_\ell}\right), & x \in I_{\ell,j_\ell-1} \\ \phi\left(\frac{x-x_{\ell,j_\ell-1}}{h_\ell}\right), & x \in I_{\ell,j_\ell} \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (30)$$

και

$$\phi_{\ell,2j_\ell}(x) = \begin{cases} -h_\ell \psi\left(\frac{x_{\ell,j_\ell-1}-x}{h_\ell}\right) & , \quad x \in I_{\ell,j_\ell-1} \\ h_\ell \psi\left(\frac{x-x_{\ell,j_\ell-1}}{h_\ell}\right) & , \quad x \in I_{\ell,j_\ell} \\ 0 & , \quad \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (31)$$

με  $I_{\ell,j_\ell} := [x_{\ell,j_\ell-1}, x_{\ell,j_\ell}]$ ,  $j_\ell = 1, \dots, N_\ell$ . Οι συναρτήσεις  $\phi(s)$  και  $\psi(s)$  προέρχονται συμβολίζουν τα Hermite κυβικά πολυώνυμα στο  $[0, 1]$  δηλαδή:

$$\phi(s) = (1-s)^2(1+2s) \quad , \quad \psi(s) = s(1-s)^2 \quad , \quad (32)$$

με  $s \in [0, 1]$ .

Για την λύση  $u$  του μαθηματικού προβλήματος (24), αφού υπάρχουν ασυνέχειες στα σημεία διασύνδεσης  $w_1 \equiv x_{N_1+1}$  και  $w_2 \equiv x_{N_1+2+1}$  είναι προφανές ότι θα πρέπει να εξαναγκάσουμε την προσεγγιστική λύση  $U_\ell(x, t)$  να ικανοποιεί τις συνθήκες

$$[Du_x] := D^+u_x^+ - D^-u_x^- = 0 \quad , \quad \text{για } x = w_k \quad , \quad k = 1, 2 \quad . \quad (33)$$

ισοδύναμα:

$$\gamma \phi_{2i}(x_i^-) = \phi_{2i}(x_i^+), \quad i = N_1 + 1 \quad (34)$$

και

$$\gamma \phi_{2i}(x_i^-) = \phi_{2i}(x_i^+), \quad i = N_1 + 2 + 1 \quad (35)$$

Οπότε στα σημεία διεπαφής, και προκειμένου να ικανοποιήσουμε τις ασυνέχειες, ορίζουμε ως νέα γενικευμένα ασυνεχή Hermite τις συναρτήσεις βάσης  $\phi_{\ell,2j_\ell}(x)$  ως εξής:

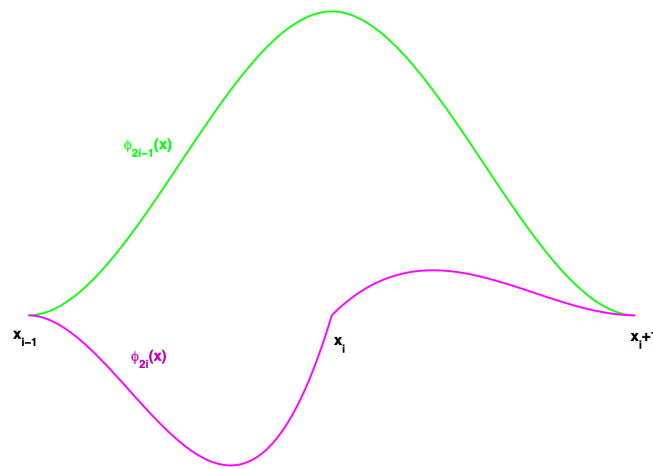
1η -2η περιοχή :

$$\phi_{2i}(x) = \begin{cases} -\frac{h}{\gamma} \psi\left(\frac{x_i-x}{h}\right) & , \quad x \in I_{\ell,j_\ell-1} \\ h \psi\left(\frac{x-x_i}{h}\right) & , \quad x \in I_{\ell,j_\ell}, \quad i = N_1 + 2 \\ 0 & , \quad \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (36)$$

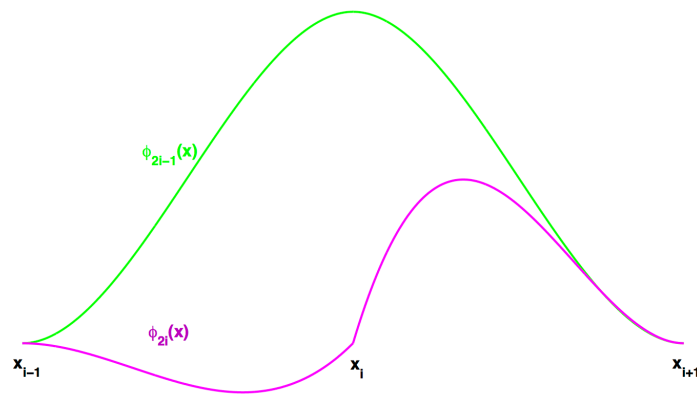
2η -3η περιοχή :

$$\phi_{2i}(x) = \begin{cases} -h_\ell \psi \left( \frac{x_{\ell,j_\ell-1}-x}{h_\ell} \right) & , \quad x \in I_{\ell,j_\ell-1} \\ \frac{h_\ell}{\gamma} \psi \left( \frac{x-x_{\ell,j_\ell-1}}{h_\ell} \right) & , \quad x \in I_{\ell,j_\ell}, \quad j_\ell = N_1 + N_2 + 2 \\ 0 & , \quad \text{διαφορετικά} \end{cases} \quad (37)$$

Μία γραφική αναπαράσταση, για  $\gamma = 0.3$ , των παραπάνω συναρτήσεων παρατίθεται στα σχήματα που ακολουθούν:



Σχήμα 4: Κυβικά πολυώνυμα Hermite



Σχήμα 5: Κυβικά πολυώνυμα Hermite

Χρησιμοποιώντας τώρα τη νέα βάση Hermite, και αντικαθιστώντας την προσεγγιστική λύση (29) στη διαφορική εξίσωση προκύπτει ότι:

$$\sum_{j=1}^{N+1} [\dot{\alpha}_{2j-1}(t)\phi_{2j-1}(x) + \dot{\alpha}_{2j}(t)\phi_{2j}(x)] =$$

$$D \sum_{j=1}^{N+1} [\alpha_{2j-1}(t)\phi_{2j-1}''(x) + \alpha_{2j}(t)\phi_{2j}''(x)], \quad (38)$$

όπου με τη τελεία δηλώνουμε τη πρώτη παράγωγο ως προς το χρόνο. Εάν τώρα απαιτήσουμε η παραπάνω σχέση να επαληθεύεται ακριβώς στα δύο εσωτερικά σημεία Gauss του κάθε υποδιαστήματος, οι στοιχειώδεις collocation εξισώσεις που αντιστοιχούν στο στοιχείο  $I_j$ ,  $j = 1, \dots, N$  παίρνουν τη μορφή πίνακα:

$$C_j^{(0)} \begin{bmatrix} \dot{\alpha}_{2j-1} \\ \dot{\alpha}_{2j} \\ \dot{\alpha}_{2j+1} \\ \dot{\alpha}_{2j+2} \end{bmatrix} = \frac{D}{h^2} C_j^{(2)} \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1} \\ \alpha_{2j} \\ \alpha_{2j+1} \\ \alpha_{2j+2} \end{bmatrix} \quad (39)$$

όπου τα  $h$  και  $D$  έχουν οριστεί στις εξισώσεις (26) και (21) και

$$C_j^{(0)} := \begin{bmatrix} s_1^{(0)} & \frac{h}{\alpha_i} s_2^{(0)} & s_3^{(0)} & -\frac{h}{\beta_i} s_4^{(0)} \\ s_3^{(0)} & \frac{h}{\alpha_i} s_4^{(0)} & s_1^{(0)} & -\frac{h}{\beta_i} s_2^{(0)} \end{bmatrix} \quad (40)$$

όπου  $s_1^{(0)} = \frac{9+4\sqrt{3}}{18}$ ,  $s_2^{(0)} = \frac{3+\sqrt{3}}{36}$ ,  $s_3^{(0)} = \frac{9-4\sqrt{3}}{18}$ ,  $s_4^{(0)} = \frac{3-\sqrt{3}}{36}$ , ενώ

$$C_j^{(2)} := \begin{bmatrix} s_1^{(2)} & \frac{h}{\alpha_i} s_2^{(2)} & s_3^{(2)} & -\frac{h}{\beta_i} s_4^{(2)} \\ s_3^{(2)} & \frac{h}{\alpha_i} s_4^{(2)} & s_1^{(2)} & -\frac{h}{\beta_i} s_2^{(2)} \end{bmatrix} \quad (41)$$

με  $s_1^{(2)} = -2\sqrt{3}$ ,  $s_2^{(2)} = -1 - \sqrt{3}$ ,  $s_3^{(2)} = 2\sqrt{3}$  και  $s_4^{(2)} = -1 + \sqrt{3}$ .

Οι σταθερές  $\alpha_i$  και  $\beta_i$  χρησιμοποιούνται για να ξεχωρίζουμε τους στοιχειώδεις πίνακες για τα στοιχεία  $I_{N_1}$  και  $I_{N_1+N_2+1}$ , αφού ως συναρτήσεις βάσης για τα στοιχεία αυτά χρησιμοποιούνται αντίστοιχα οι εξισώσεις (36)-(37). Δηλαδή

$$\alpha_i = \begin{cases} 1 & , \quad i \neq N_1 + N_2 + 1 \\ \gamma & , \quad i = N_1 + N_2 + 1 \end{cases} \quad (42)$$

και

$$\beta_i = \begin{cases} 1 & , \quad i \neq N_1 \\ \gamma & , \quad i = N_1 \end{cases} \quad (43)$$

Για να παράξουμε τις συνοριακές collocation εξισώσεις απαιτούμε η προσεγγιστική λύση  $U(x, t)$  να ικανοποιεί τις συνοριακές συνθήκες σε κάθε χρονικό βήμα, και ως εκ τούτου

$$\dot{\alpha}_2 = 0 \quad , \quad \alpha_2 = 0 \quad , \quad \dot{\alpha}_{2N+2} = 0, \quad \alpha_{2N+2} = 0 . \quad (44)$$

Συγκεντρώνοντας τις εσωτερικές στοιχειώδεις και συνοριακές collocation εξισώσεις καταλήγουμε στην επίλυση του collocation συστήματος:

$$A\dot{\mathbf{a}} = B\mathbf{a} \quad (45)$$

όπου  $\dot{\mathbf{a}} = [\dot{\alpha}_1 \quad \dot{\alpha}_3 \cdots \dot{\alpha}_{2N+1}]^T$ ,  $\mathbf{a} = [\alpha_1 \quad \alpha_3 \cdots \alpha_{2N+1}]^T$  και

$$A = \begin{bmatrix} \tilde{A}_1 & B_1 & & & & \\ & A_2 & B_2 & & & \\ & & \searrow & & & \\ & & A_{N-1} & B_{N-1} & & \\ & & & A_N & \tilde{B}_N & \end{bmatrix}, \quad (46)$$

$$B = \begin{bmatrix} \tilde{F}_1 & G_1 & & & & \\ & F_2 & G_2 & & & \\ & & \searrow & & & \\ & & F_{N-1} & G_{N-1} & & \\ & & & F_N & \tilde{G}_N & \end{bmatrix}. \quad (47)$$

με  $A_j, B_j, F_j$  και  $G_j$   $2 \times 2$  πίνακες οι οποίοι ορίζονται από τις σχέσεις (40) και

$$[A_j \quad B_j] = C_j^{(0)} \quad \text{και} \quad [F_j \quad G_j] = \frac{D}{h^2} C_j^{(2)}. \quad (48)$$

Οι  $2 \times 1$  πίνακες  $\tilde{A}_1, \tilde{F}_1$  προκύπτουν από τους αντίστοιχούς πίνακες  $A_1$  και  $F_1$  αν παραλείψουμε τη δεύτερη στήλη. Αντίστοιχα οι πίνακες  $\tilde{B}_N, \tilde{G}_N$  προκύπτουν από τους αντίστοιχούς πίνακες  $B_N$  και  $G_N$  αν παραλείψουμε τη πρώτη στήλη.

Το σύστημα (45) μπορεί να θεωρηθεί και ως σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων της μορφής:

$$\dot{\mathbf{a}} = C(t, \mathbf{a}) \quad (49)$$

όπου  $C(t, \mathbf{a}) = A^{-1}B\mathbf{a}$ .

### 3 Αριθμητικά Αποτελέσματα Υλοποιήσεων

#### 3.1 Αποτελέσματα υλοποίησης σε ένα GPU Shared-memory υπολογιστικό σύστημα

Το HP SL390s G7 είναι ένα υπολογιστικό σύστημα αρχιτεκτονικής κοινής μνήμης, που αποτελείται από 6-πυρήνους τύπου Xeon X5660@2.8GHz επεξεργαστές με 12 MB Level 3 μνήμης cache. Η συνολική μνήμη είναι 24 GB και το λειτουργικό σύστημα είναι Oracle Linux, έκδοσης 6.2. Επίσης, διαθέτει γραφικό υποσύστημα τύπου GPU Tesla M2070 της σειράς Fermi [30], συνδεδεμένο μέσω διαύλου PCI-gen2. Η GPU έχει 6GB μνήμης και 448 πυρήνες σε 14 πολυεπεξεργαστές. Η εφαρμογή αναπτύχθηκε σε γλώσσα προγραμματισμού Fortran, διπλής ακρίβειας, χρησιμοποιώντας τα πρότυπα OpenMP [31, 32] και OpenACC [33] με μεταγλωτιστές PGI έκδοσης 12.9 [34]. Για τις βασικές πράξεις γραμμικής άλγεβρας, χρησιμοποιούνται υλοποιήσεις διαδικασιών από τις επιστημονικές βιβλιοθήκες BLAS και LAPACK [35].

Στην υλοποίηση του παραπάνω παράλληλου αλγόριθμου, επιλύεται το πρόβλημα δοκιμής Dirichlet Modified Helmholtz με  $\lambda = 1$ , το οποίο έχει την παρακάτω αναλυτική λύση

$$u(x, y) = 10 \phi(x) \phi(y), \quad \phi(x) = e^{-100(x-0.1)^2} (x^2 - x),$$

Ο ακόλουθος πίνακας παρουσιάζει την συμπεριφορά της μεθόδου για διακριτοποίηση μεγέθους έως και 2048 πεττερασμένων στοιχείων ανά κατεύθυνση, με αναφορά στα απαιτούμενα βήματα σύγκλισης και την Ευκλείδεια νόρμα του σφάλματος του γραμμικού συστήματος.

| $n_s$ | Επαναληπτικά βήματα | $\ b - Ax^{(m)}\ _2$ |
|-------|---------------------|----------------------|
| 256   | 294                 | 6.06e-11             |
| 512   | 589                 | 2.85e-11             |
| 1024  | 1161                | 1.39e-11             |
| 2048  | 3726                | 9.59e-12             |

Στη μελέτη της συμπεριφοράς εκτέλεσης του παράλληλου αλγορίθμου για την υλοποίηση στο συγκεκριμένο υπολογιστικό περιβάλλον, έγινε συλλογή μετρήσεων των χρόνων εκτέλεσης για διάφορες παραμέτρους του προβλήματος, όπως η χρήση του γραφικού υποσυστήματος υπολογισμών και του πληθους των CPU πυρήνων. Οι παρακάτω πίνακες εμφανίζουν αυτές τις μετρήσεις σε δευτερόλεπτα για διαφορετικού μεγέθους προβλήματα με διακριτοποιήσεις από  $n_s = 256$  έως και  $n_s = 2048$ .

| $n_s = 256$ | CPU        | GPU + CPU  |
|-------------|------------|------------|
| CPU cores   | Total Time | Total Time |
| 1           | 12.24      | 11.18      |
| 2           | 8.12       | 7.53       |
| 4           | 4.87       | 5.63       |

| $n_s = 512$ | CPU        | GPU + CPU  |
|-------------|------------|------------|
| CPU cores   | Total Time | Total Time |
| 1           | 88.83      | 71.25      |
| 2           | 52.94      | 46.59      |
| 4           | 34.25      | 32.63      |

| $n_s = 1024$ | CPU        | GPU + CPU  |
|--------------|------------|------------|
| CPU cores    | Total Time | Total Time |
| 1            | 750.35     | 549.82     |
| 2            | 448.76     | 352.95     |
| 4            | 283.14     | 250.64     |

| $n_s = 2048$ | CPU        | GPU + CPU  |
|--------------|------------|------------|
| CPU cores    | Total Time | Total Time |
| 1            | 9176       | 6770       |
| 2            | 5001       | 4387       |
| 4            | 2999       | 2839       |

Στο παρακάτω πίνακα εμφανίζονται λεπτομερώς οι μετρήσεις κάθε χρόνου εκτέλεσης για τις περιπτώσεις χρήσης της GPU. Οι χρόνοι μεταφοράς δεδομένων μεταξύ μνήμης των CPU και GPU και αντίστροφα παρουσιάζονται για όλα τα προβλήματα διακριτοποιήσεων. Επίσης μετρήθηκαν οι χρόνοι εκτέλεσης για κάθε διαθέσιμο αριθμό CPU υπολογιστικών πυρήνων.

| $n_s$ | GPU - CPU<br>Comm. Time | Computation Time |         |         |
|-------|-------------------------|------------------|---------|---------|
|       |                         | 1 Core           | 2 Cores | 4 Cores |
| 256   | 1.52                    | 9.66             | 6.01    | 4.11    |
| 512   | 6.81                    | 64.44            | 39.78   | 25.82   |
| 1024  | 44.3                    | 505.5            | 308.6   | 206.3   |
| 2048  | 541                     | 6229             | 3846    | 2298    |

Πρέπει να αναφερθεί ότι ο χρόνος επικοινωνίας μεταξύ των CPU και GPU είναι ανεξάρτητος του αριθμού των πυρήνων της CPU, διότι στον αλγόριθμο η διαδικασία μεταφοράς των δεδομένων μεταξύ μνήμης CPU) και GPU πραγματοποιείται από ένα μόνο υπολογιστικό thread για λόγους ισοκατανομής του υπολογιστικού φορτίου. Έτσι αποφεύγονται φαινόμενα deadlock των δεδομένων κατά τη κίνηση τους μεταξύ πολλαπλών CPU threads προς τη μνήμη του γραφικού υποσυστήματος διαμέσου του διαύλου PCI του μηχανήματος.

### 3.1.1 Συμπεράσματα υλοποίησης

Σε αυτή την ερευνητική δραστηριότητα αναπτύχθηκε ένας νέος παράλληλος αλγόριθμος για την υλοποίηση της επαναληπτικής μεθόδου BiCGSTAB, με σκοπό την επίλυση των εξισώσεων Hermite Collocation που προκύπτουν από ελλειπτικού τύπου μερικές διαφορικές εξισώσεις. Ο αλγόριθμος υλοποιήθηκε σε πολυεπεξεργαστικά συστήματα με γραφικά υποσυστήματα. Η απόδοση του αλγορίθμου εξαρτάται από το μέγεθος του προβλήματος και τον αριθμό των διαθέσιμων επεξεργαστών. Παρατηρήθηκε βελτίωση της απόδοσης έως και περίπου 30%.

## 3.2 Η ασυνεχής Collocation σε 3 περιοχές

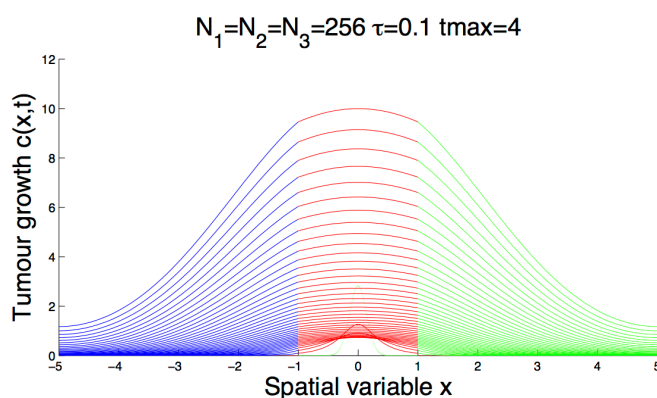
Τα αριθμητικά αποτελέσματα των μεθόδων που αναπτύχθηκαν στην παρούσα Τεχνική Έκθεση και αφορούν ιατρικές εφαρμογές, παρουσιάζονται αναλυτικά στην Τεχνική Έκθεση 4.2 Έτος 2012. Για να επιβεβαιώσουμε όμως την τέταρτη τάξη σύγκλισης της dDHC παραθέτουμε τα παρακάτω αποτελέσματα που αναφέρονται στο πρόβλημα (19) με τιμές των παραμέτρων ως ακολούθως:

$$a = -5, w_1 = -1, w_2 = 1, b = 5, \gamma = 0.5$$

και

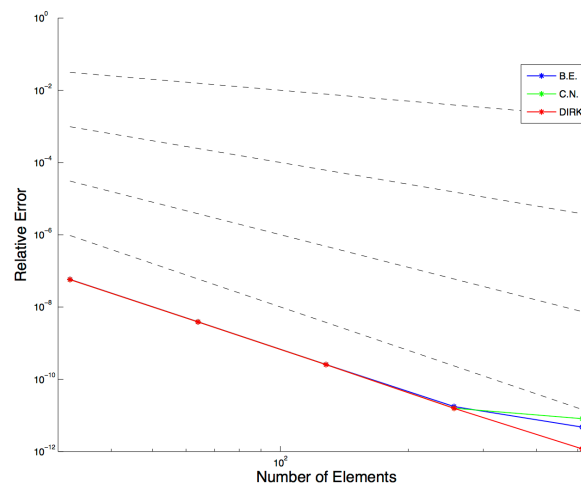
$$f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\eta^2}.$$

Στο σχήμα 6 απεικονίζεται το προφίλ της λύσης, ενώ στο σχήμα 6 επιβεβαιώνε-



Σχήμα 6: Η απόδοση της μεθόδου (dDHC)/(BE)

ται η τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου με διάφορα σχήματα διακριτοποίησης του χρόνου.



Σχήμα 7: Τάξη σύγκλισης της dDHC μεθόδου.

## 4 Παραδοτέα

- Παπαδομανωλάκη Μαρία " Η μέθοδος Collocation για παραβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης: στην κατεύθυνση προσομοίωσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου." Διδακτορική Διατριβή 2012.
- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB και FORTRAN
- Η παρούσα Τεχνική Έκθεση

## 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.

## 6 Μελλοντικές Δράσεις

- Επέκταση της μεθόδου collocation με ασυνεχή στοιχεία Hermite σε  $N$  περιοχές και αρχικές πηγές για τις  $1 + 1$  διαστάσεις.
- Ανάπτυξη της dDHC/HC για μη γραμμικά προβλήματα  $1 + 1$  διαστάσεων

- Ανάπτυξη της dDHC για προβλήματα στις  $2 + 1$  διαστάσεις

## Αναφορές

- [1] R. Alexander "Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE's," *SIAM Num. Anal.*, vol. 14 no. 6, pp. 1006-1021, 1977.
- [2] C. de Boor and B. Swartz "Collocation at Gaussian points," *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.
- [3] P.K.Burgess,P.M.Kulesa,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr. "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas," *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology* , vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.
- [4] J.C.Butcher "Implicit Runge-Kutta processes ," *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.
- [5] 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*, vol. 28, pp. 399–414, 2002.
- [6] M. Crouzeix" Sur l'approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par des methodes de Runge Kutta," *PHD Thesis, Univercity Paris VI, Paris*,1975.
- [7] J.C.Butcher "The numerical analysis of ordinary differential equations ," *John Wiley* , 1987.
- [8] C.C.Christara, "Parallel solvers for spline collocation equations," *Advances in Engineering Software*, vol. 27, pp. 71–89, 1996.
- [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] J. Dongarra, I. Duff, D. Sorensen, and H. van der Vorst, *Numerical Linear Algebra for high-performance computers*. Phil.: SIAM, 1998.
- [11] C. E. Houstis, E. N. Houstis, and J. Rice, "Pde computations: Methods and performance evaluation," *Par. Comp.*, vol. 5, pp. 141–163, 1997.

- [12] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, "Iterative solution of elliptic collocation systems on a cognitive parallel computer," *Computers and Maths with Appl.*, vol. 48, pp. 951–970, 2004.
- [13] —, "Mapping parallel iterative algorithms for pde computations on a distributed memory computers," *Parallel Algorithms and Applications*, vol. 8, pp. 141–154, 1996.
- [14] —, "Bi-cgstab for collocation equations on distributed memory parallel computers," *Numerical Mathematics and advanced applications - ENUMATH 2001*, Springer, pp. 957–966, 2003.
- [15] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, "Preconditioning for solving hermite collocation by the bi-cgstab," *WSEAS Trans. on Mathematics*, vol. (5),7, pp. 811–816, 2006.
- [16] 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*, vol. (4),3, pp. 179–184, 2007.
- [17] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [18] M.G. Papadomanolaki and Y.G. Saridakis "Collocation with discontinuous Hermite elements for a tumour invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions," in *Proceedings of Numan2010 conference "Conference in Numerical Analysis"*, pp. 238-245, 2010.
- [19] 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)
- [20] T. Papatheodorou, "Block aor iteration for nonsymmetric matrices," *Math. Comp.*, vol. (41),164, pp. 511–525, 1983.
- [21] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [22] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition)," *Oxford University Press*, 1985.
- [23] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.

- [24] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray “A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter,” *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] R. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, New York: Springer Verlag, 2000.
- [28] 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.*, vol. 13, pp. 631–644, 1992.
- [29] 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.
- [30] <http://www.nvidia.com/object/tesla-servers.html>.
- [31] C. Rohit, *Parallel programming with OpenMP*. M. K., 2001.
- [32] <http://www.openmp.org>.
- [33] <http://www.openacc.org>.
- [34] <http://www.pgroup.com>.
- [35] <http://www.netlib.org>.

## Παράρτημα Β΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED - MIS  
379416)

## Δράση 2.2

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές

## Περιεχόμενα

|          |                                                           |          |
|----------|-----------------------------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Σκοπός</b>                                             | <b>3</b> |
| <b>2</b> | <b>Μεθοδολογία</b>                                        | <b>3</b> |
| 2.1      | Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων | 3        |
| <b>3</b> | <b>Παραδοτέα</b>                                          | <b>6</b> |
| <b>4</b> | <b>Συνεργασίες</b>                                        | <b>6</b> |
| <b>5</b> | <b>Μελλοντικές Δράσεις</b>                                | <b>7</b> |
| <b>6</b> | <b>Βιβλιογραφία</b>                                       | <b>7</b> |



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

## 1 Σκοπός

Το παρόν έργο θα ασχοληθεί με τη προσομοίωση πολύπλοκων φαινομένων που περιγράφονται από σύνθετα προβλήματα μερικών διαφορικών εξισώσεων με πολλαπλά χωρία και πολλαπλά μοντέλα φυσικής (multidomain multiphysics problems - MDMP) και με την επίλυσή τους σε περιβάλλοντα με σύγχρονες αρχιτεκτονικές. Η Δράση 2.2 (Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ) ξεκινά την υλοποίησή της με μια επισκόπηση των μεθόδων που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση τέτοιων προβλημάτων. Μελετώντας τη σχέση ανάμεσα στα χαρακτηριστικά των προβλημάτων και στις μεθοδολογίες που χρησιμοποιούνται στην προσομοίωση τους, θα μπορέσουμε να επιλέξουμε τις πλέον κατάλληλες μεθόδους για τις εφαρμογές του MATENVMED, τα προβλήματα από την Ιατρική και την Περιβαλλοντική Μηχανική.

Το υπόλοιπο της παρούσης Ετήσιας Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε.

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων

Η προσομοίωση φαινομένων που περιγράφονται με πολλαπλά φυσικά μοντέλα σε πολλαπλά χωρία, είναι μια ερευνητική περιοχή η οποία ελκύει το ενδιαφέρον των επιστημόνων από πολλές και διαφορετικές περιοχές τόσο στο παρελθόν [1] αλλά και σήμερα [2]. Η υπολογιστική ισχύς αυξάνεται και προσφέρεται σε όλα τα επίπεδα του υλικού του υπολογιστή, από πολυ-επεξεργαστές υψηλών επιδόσεων (high speed multi-processors) και συστοιχίες υπολογιστών (clusters) έως πολυπύρηνες κάρτες γραφικών (multi-core GPUs). Το γεγονός αυτό κάνει δυνατή την ακριβή προσομοίωση πραγματικών φαινομένων σε αποδεκτούς χρόνους εκτέλεσης. Επίσης η πληθώρα υπολογιστικών περιβαλλόντων [3]–[8] επιτρέπει την καλύτερη δυνατή αξιοποίηση των διαθέσιμων δυνατοτήτων του υλικού (hardware) και του λογισμικού (software). Αυτό μας φέρνει ένα βήμα πιο κοντά στην προσομοίωση προβλημάτων του πραγματικού κόσμου με αποτελεσματικότητα και ακρίβεια.

Ένα πρόβλημα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων είναι πρόβλημα που αποτελείται από πολλαπλά επιμέρους προβλήματα, τα οποία συνήθως διέπονται από διαφορετικούς νόμους και αρχές. Για παράδειγμα νόμους

διατήρησης ή καταστατικούς νόμους και αρχές ισορροπίας ή εξέλιξης. Οι συνιστώσες ενός τέτοιου προβλήματος πολλαπλών φυσικών/χωρίων, συχνά ονομάζονται υποπροβλήματα ή επιμέρους προβλήματα του αρχικού-συνολικού προβλήματος, και συνδέονται μεταξύ τους μέσα από συστήματα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ) σε κοινά ή/και επικαλυπτόμενα χωρία ή μέσω συνοριακών συνθηκών πάνω στις διεπαφές (κοινά σύνορα) μεταξύ των γειτονικών επιμέρους χωρίων/πεδίων.

Στην πρώτη κατηγορία θα μπορούσαμε να εντοπίσουμε προβλήματα που αφορούν την ηλεκτρική ενέργεια και το μαγνητισμό με υδροδυναμική, ενώ η δεύτερη κατηγορία περιλαμβάνει multiphysics προβλήματα όπως fluid-structure dynamics (aeroelasticity) ή δυναμική των ωκεανών-ατμόσφαιρας (γεωφυσική) [2] κλπ.

Όλα τα προβλήματα πολλαπλών φυσικών και χωρίων ορίζονται μέσα από αλγεβρικές μορφές, πριν διακριτοποιηθούν για να επιλυθούν με οποιαδήποτε κατάλληλη μέθοδο. Οι δύο πιο συνήθεις [2] αλγεβρικές μορφές είναι: (i) το συζευγμένο πρόβλημα ισορροπίας (coupled equilibrium problem - (1))

$$F(u) \equiv \begin{pmatrix} F_1(u_1, u_2) \\ F_2(u_1, u_2) \end{pmatrix} = 0, \quad (1)$$

και (ii) το συζευγμένο πρόβλημα εξέλιξης (coupled evolution problem - (2))

$$\begin{aligned} \partial_t u_1 &= f_1(u_1, u_2) \\ \partial_t u_2 &= f_2(u_1, u_2) \end{aligned} \quad (2)$$

Θέτοντας  $J = \frac{\partial(F_1, F_2)}{\partial(u_1, u_2)}$  και  $u = (u_1, u_2)^T$ , οι αλγόριθμοι αντιμετώπισης προβλημάτων ισορροπίας (1) μπορούν να κατηγοριοποιηθούν σε 3 ομάδες όπως αυτές καταγράφονται στον Πίνακα 1. Συγκεκριμένα υπάρχουν οι μεθοδολογίες Jacobi, Gauss-Seidel και Newton. Υποθέτοντας ότι το αρχικό πρόβλημα αποτελείται από δύο επιμέρους προβλήματα τότε οι αλγόριθμοι σημειώνονται ως εξής:

| Jacobi                                            | Gauss-Seidel                             | Newton                               |
|---------------------------------------------------|------------------------------------------|--------------------------------------|
| Ορισμός αρχικής τιμής ( $u_1^0, u_2^0$ )          |                                          |                                      |
| Για $k=1,2,\dots$ (έως ότου παρατηρηθεί σύγκλιση) |                                          |                                      |
| Υπολόγισε τις ( $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}$ )          | Υπολόγισε τις ( $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}$ ) | Υπολόγισε το $\delta u$              |
| $F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$                       | $F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$              | $J(u^k)\delta u = -F(u^k)$           |
| $F_2(u_1^k, u_2^{k+1}) = 0$                       | $F_2(u_1^{k+1}, u_2^{k+1}) = 0$          | Υπολόγισε $u^{k+1} = u^k + \delta u$ |
| Τέλος βήματος επαναληπτικής διαδικασίας           |                                          |                                      |

Πίνακας 1: Κατηγορίες αλγορίθμων για προβλήματα ισορροπίας.

Παρατηρούμε ότι στην αριστερή κλάση των αλγορίθμων η εκτέλεση ακολουθεί την μεθοδολογία Jacobi για την επίλυση συστήματος γραμμικών εξισώσεων.

Για παράδειγμα στην  $k$  επανάληψη, η νέα λύση στο πρώτο χωρίο  $u_1^{k+1}$  υπολογίζεται με βάση την προηγούμενη λύση από το γειτονικό χωρίο  $u_2^k$ , ενώ η νέα λύση στο δεύτερο χωρίο  $u_2^{k+1}$  υπολογίζεται με βάση την προηγούμενη λύση από το πρώτο χωρίο  $u_1^k$ . Η διαδικασία αυτή μπορεί να επεκταθεί για περισσότερα από δύο υποχωρία, όπου κάθε φορά η νέα λύση  $u_i^{k+1}$  στο  $i$  χωρίο υπολογίζεται χρησιμοποιώντας πληροφορία από τη λύση όλων των γειτονικών χωρίων στην προηγούμενη επανάληψη  $k$ . Το συγκεκριμένο σχήμα είναι πλήρως παραλληλίσμο, αφού χρησιμοποιώντας τις λύσεις των επιμέρους προβλημάτων από την προηγούμενη επανάληψη, μπορούμε να υπολογίσουμε τις νέες λύσεις σε όλα τα χωρία ταυτόχρονα.

Οι μέθοδοι τύπου Gauss-Seidel, ακολουθούν το πρότυπο της αντίστοιχης μεθόδου για την επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων. Υποθέτοντας ότι έχουμε  $n$  επιμέρους συζευγμένα προβλήματα, η νέα λύση  $u_i^{k+1}$  στο  $i$  χωρίο υπολογίζεται λαμβάνοντας υπόψιν όλες τις  $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}, \dots, u_{i-1}^{k+1}$  από την τρέχουσα επανάληψη και τις  $u_{i+1}^k, \dots, u_n^k$  από την προηγούμενη επανάληψη. Η συγκεκριμένη μεθοδολογία δεν έχει χαρακτηριστικά παραλληλισμού, ωστόσο λόγω της άμεσης χρήσης των διορθωμένων τιμών των γειτόνων συγκλίνει ταχύτερα της Jacobi.

Τέλος, οι αλγόριθμοι τύπου Newton, θεωρούνται αυστηρά συζευγμένα σχήματα καθώς εμπλέκουν τις  $\frac{\partial F_i}{\partial u_j}$  στον Ιακωβιανό πίνακα του συστήματος και χρησιμοποιούνται τόσο σε προβλήματα ισορροπίας όσο και σε προβλήματα εξέλιξης.

|                                                                                                                                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Ορισμός αρχικής συνθήκης ( $u_1(t_0), u_2(t_0)$ )                                                                                                |
| Για $n = 1, \dots, N_t$                                                                                                                          |
| Προχωρούμε ένα βήμα στο χρόνο για την $u_1$ λύνοντας την $\partial_t u_1 = f_1(u_1, u_2(t_{n-1}))$<br>στο $n$ χρονικό σημείο (δηλ., $u_1(t_n)$ ) |
| Προχωρούμε ένα βήμα στο χρόνο για την $u_2$ λύνοντας την $\partial_t u_2 = f_2(u_1(t_n), u_2)$<br>στο $n$ χρονικό σημείο (δηλ., $u_2(t_n)$ )     |
| Τέλος βήματος επαναληπτικής διαδικασίας                                                                                                          |

Πίνακας 2: Αλγόριθμοι για προβλήματα εξέλιξης.

Για τα προβλήματα εξέλιξης σε πολλαπλά χωρία και φυσικά μοντέλα, θεωρούμε σχήματα όπως αυτό του Πίνακα 2. Η μεθοδολογία αυτή είναι η απλούστερη δυνατή για την επίλυση παραβολικών προβλημάτων πολλαπλών χωρίων και πολλαπλών φυσικών μοντέλων. Κάθε επιμέρους πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπιστεί με άμεσα ή έμμεσα σχήματα για τη διακριτοποίηση ως προς το χρόνο. Σε κάθε βήμα στο χρόνο χρησιμοποιούμε εμφωλευμένη επαναληπτική διαδικασία για βελτίωση της λύσης στο steady πρόβλημα της συγκεκριμένης χρονικής στιγμής.

Οι μέθοδοι διαχωρισμού του χωρίου [9]–[15] είναι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν αρχικά για να αντιμετωπίσουν τέτοιου είδους προβλήματα. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι ότι διακριτοποιείται το ατομικό σύνθετο πρόβλημα (ακόμη

και αν είναι ήδη χωρισμένο από τη φυσική του) και στη συνέχεια κόβεται σε επιμέρους προβλήματα σε επίπεδο γραμμικής άλγεβρας. Πλήθος μεθόδων, κυρίως επαναληπτικές χρησιμοποιούνται για να επιλύσουν τα επιμέρους γραμμικά συστήματα που προκύπτουν τα οποία είναι ισχυρά συζευγμένα.

Οι Μέθοδοι Χαλάρωσης στη Διεπαφή (ΜΧΔ) [16] αποτελούν μια εναλλακτική μεθοδολογία για την αντιμετώπιση σύνθετων προβλημάτων. Ακολουθούν τη φυσική του προβλήματος προκειμένου να χωρίσουν το σύνθετο πρόβλημα σε επιμέρους προβλήματα απλούστερης γεωμετρίας και φυσικών μοντέλων. Τα υποπροβλήματα αυτά είναι συζευγμένα με κατάλληλες συνθήκες (που επιβάλλει το αρχικό πρόβλημα) πάνω στα κοινά σύνορα των υποχωρίων τους, που ονομάζονται διεπαφές. Παραδείγματα τέτοιων συνθηκών είναι η συνέχεια ή/και η ομαλότητα της λύσης του αρχικού προβλήματος.

### 3 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της Δράσης 2.2, για το 2012, σύμφωνα με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:

**Ετήσια Τεχνική Έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων:** το παρόν κείμενο.

### 4 Συνεργασίες

Στα πλαίσια της Δράσης 2.2, συνεργάστηκαν μέλη από όλες τις ερευνητικές ομάδες με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας).

Η συνεργασία είχε σκοπό την κατανόηση των ιδιοτήτων των προβλημάτων πολλαπλών χωρίων και πολλαπλών φυσικών μοντέλων (MDMP). Μελέτη προβλημάτων από την Ιατρική και τη περιβαλλοντική μηχανική προκειμένου να βρεθούν κατάλληλες μαθηματικές μέθοδοι για προσομοίωσής τους.

|                                            | ΚΕΟ 1 | ΚΕΟ 2 | ΚΕΟ 3 |
|--------------------------------------------|-------|-------|-------|
| Μελέτη ιδιοτήτων προβλημάτων MDMP          | X     | X     | X     |
| Μελέτη προβλημάτων Ιατρικής                | X     | X     |       |
| Μελέτη προβλημάτων Περιβαλλοντικής Φυσικής | X     | X     |       |

Πίνακας 3: Συνεργασίες των τριών ερευνητικών ομάδων στα πλαίσια της Δράσης 2.2.

## 5 Μελλοντικές Δράσεις

Κατά τη διάρκεια του 2012 πραγματοποιήσαμε μια επισκόπηση των μεθοδολογιών προσομοίωσης MDMP προβλημάτων. Επίσης μελετήσαμε τα χαρακτηριστικά των εφαρμογών του έργου προκειμένου να βρεθούν κατάλληλες μέθοδοι για την αντιμετώπιση τους. Ξεκινήσαμε να μελετάμε τις ΜΧΔ και σε αυτές θα επικεντρωθούμε στη Δράση 2.2 στα επόμενα βήματα για να αντιμετωπίσουμε απλά προβλήματα MDMP αλλά και πιο πολύπλοκα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου. Συγκεκριμένα, θα μελετήσουμε περαιτέρω μεθοδολογίες για τη λύση ελλειπτικών και παραβολικών κατάλληλες για τα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής.

## 6 Βιβλιογραφία

### References

- [1] M. Mu and J. R. Rice, "Modeling with collaborating pde solvers: Theory and practice," *Contemporary Mathematics*, vol. 180, pp. 427–427, 1994.
- [2] D. E. Keyes, L. C. McInnes, C. Woodward, W. D. Gropp, E. Myra, and M. Pernice, "Multiphysics simulations: Challenges and opportunities," Oct. 2012. [Online]. Available: <http://hpc.sagepub.com/content/27/1/4.full.pdf+html>.
- [3] T. T. Drashansky, "An agent-based approach to building multidisciplinary problem solving environments," PhD thesis, Citeseer, 1996.
- [4] J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, "Sciagents tool: User's guide," 1998.
- [5] L. Boeleni, D. C. Marinescu, J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, "Agent based scientific simulation and modeling," *Concurrency - Practice and Experience*, vol. 12, no. 9, pp. 845–861, 2000.
- [6] S. Markus, E. N. Houstis, A. C. Catlin, J. R. Rice, P. Tsompanopoulou, E. Vavalis, D. Gottfried, K. Su, and G. Balakrishnan, "An agent-based netcentric framework for multidisciplinary problem solving environments (mpse)," *International Journal of Computational Engineering Science*, vol. 1, no. 01, pp. 33–60, 2000.

- [7] E. Houstis, A. Catlin, P. Tsompanopoulou, D. Gottfried, G. Balakrishnan, K. Su, and J. Rice, "Gasturbnlab: A multidisciplinary problem solving environment for gas turbine engine design on a network of nonhomogeneous machines," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 149, no. 1, pp. 83–100, 2002.
- [8] J. Michopoulos, P. Tsompanopoulou, E. Houstis, C. Farhat, M. Lesoinne, J. Rice, and A. Joshi, "On a data-driven environment for multiphysics applications," *Future Generation Computer Systems*, vol. 21, no. 6, pp. 953–968, 2005.
- [9] D. E. Keyes and W. D. Gropp, "A comparison of domain decomposition techniques for elliptic partial differential equations and their parallel implementation," *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, vol. 8, no. 2, pp. s166–s202, 1987.
- [10] P. Le Tallec, Y. H. De Roeck, and M. Vidrascu, "Domain decomposition methods for large linearly elliptic three-dimensional problems," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 34, no. 1, pp. 93–117, 1991.
- [11] P.-L. Lions, "On the schwarz alternating method. iii: A variant for nonoverlapping subdomains," in *Third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, SIAM Philadelphia, PA, vol. 6, 1990, pp. 202–223.
- [12] T. F. Chan and T. P. Mathew, "Domain decomposition algorithms," *Acta numerica*, vol. 3, pp. 61–143, 1994.
- [13] R. Natarajan, "Domain decomposition using spectral expansions of steklov-poincaré operators," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 16, no. 2, pp. 470–495, 1995.
- [14] J. R. Rice, E. Vavalis, and D. Yang, "Convergence analysis of a non-overlapping domain decomposition method for elliptic pdes," 1993.
- [15] W. Heinrichs, "Domain decomposition for fourth-order problems," *SIAM journal on numerical analysis*, vol. 30, no. 2, pp. 435–453, 1993.
- [16] J. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, "Interface relaxation methods for elliptic differential equations," *Applied Numerical Mathematics*, vol. 32, no. 2, pp. 219–245, 2000.

## Παράρτημα Γ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 2.3

**ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ  
ΜΕΘΟΔΟΙ**



## Περιεχόμενα

|          |                                       |          |
|----------|---------------------------------------|----------|
| <b>1</b> | <b>Σκοπός</b>                         | <b>3</b> |
| 1.1      | Συνοπτική παρουσίαση . . . . .        | 3        |
| <b>2</b> | <b>Μεθοδολογία</b>                    | <b>4</b> |
| <b>3</b> | <b>Υπάρχον λογισμικό</b>              | <b>7</b> |
| <b>4</b> | <b>Παραδοτέα</b>                      | <b>7</b> |
| <b>5</b> | <b>Συνεργασίες</b>                    | <b>9</b> |
| <b>6</b> | <b>Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις</b> | <b>9</b> |

# 1 Σκοπός

## 1.1 Συνοπτική παρουσίαση

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

**Τίτλος** Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

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

**Παραδοτέα:**

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

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

## 2 Μεθοδολογία

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

Αλλά πριν αρχίσουμε τη ουσιαστική συζήτηση για την προσομοίωση μεθοδολογία μας, ας εξετάσουμε μερικά τεχνικά σημεία. Οι τεχνικές που χρησιμοποιούμε για την προσομοίωση Monte Carlo είναι αντίστοιχες αυτών που αναφέρονται στην παραγωγή τυχαίων αριθμών. Ας δούμε ένα απλό παράδειγμα Έστω ότι θέλουμε να δημιουργήσουμε ένα προσομοιωμένο δείγμα με τη μονοδιάστατη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας  $f(x) = 1 + x^2$  στην περιοχή  $[-1.0, +1.0]$ . Υπάρχουν διάφοροι τρόποι να το κάνουμε αυτό:

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

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

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

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

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

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

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

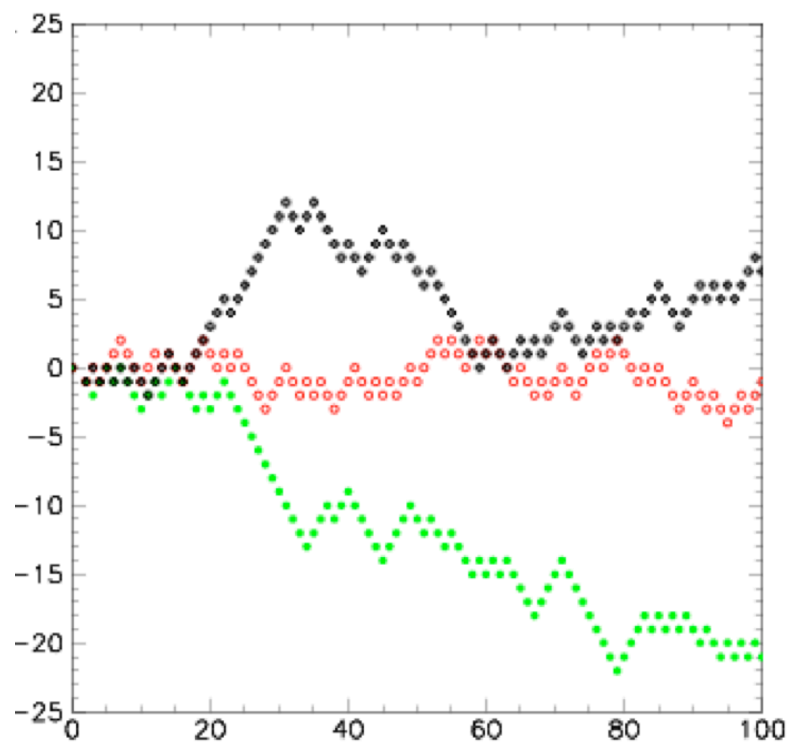
Λόγο του διεπιστημονικού χαρακτήρα της αναφερόμενης δράσης τα μέλη πρέπει να εξοικειωθούν τόσο με γενικότερες μεθοδολογίες όσο και σε θέματα

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

Listing 1: Τυχαίοι περίπατοι με μοναδιαίο βήμα σε μία διάσταση

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

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



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

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

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

### 3 Υπάρχον λογισμικό

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

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

Το πλήθος των βημάτων του περιπάτου

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

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

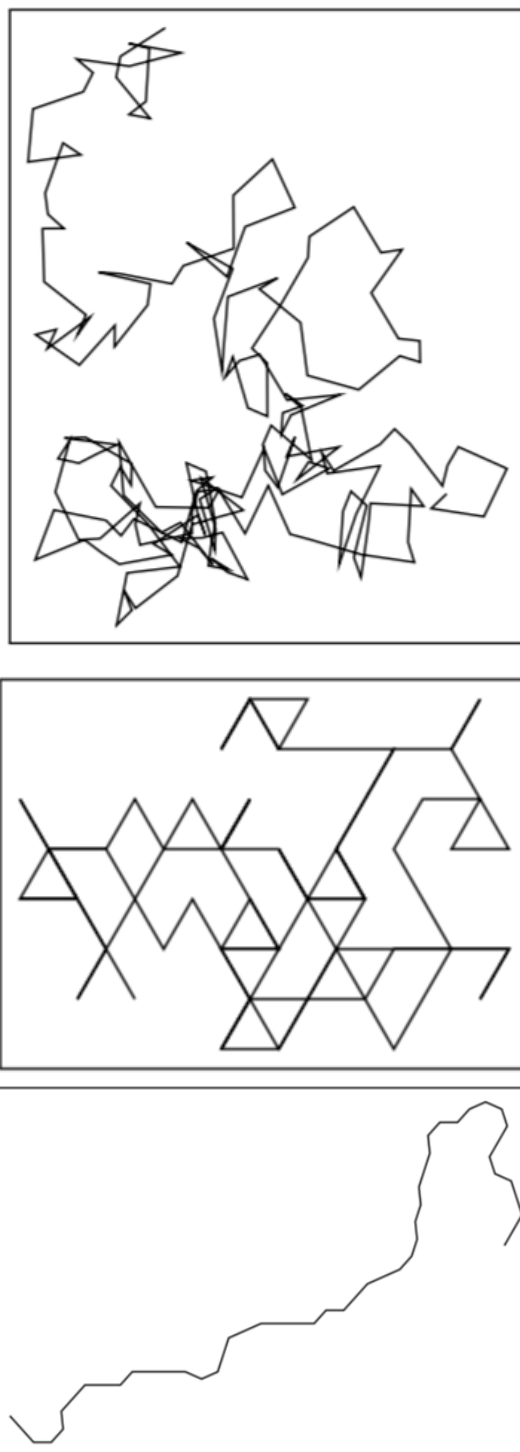
Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι οι παρακάτω εντολές έχουν σαν αποτέλεσμα του αντίστοιχους τυχαίους περιπάτους που δίνονται στο σχήμα 2

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

### 4 Παραδοτέα

**Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση** Το παρόν κείμενο.





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

## 5 Συνεργασίες

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

## 6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

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

## Αναφορές

- [1] Bruno Le Floch. *The randomwalk package: customizable random walks using TikZ*. CTAN, 2012.
- [2] Gregory F. Lawler and Vlada Limic. *Random Walk: A Modern Introduction*. Cambridge Studies in Advanced Mathematics (No. 123), 2015.

## Παράρτημα Δ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 2.4

Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά

## Περιεχόμενα

|          |                                                                             |           |
|----------|-----------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Σκοπός</b>                                                               | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Μεθοδολογία</b>                                                          | <b>3</b>  |
| 2.1      | Πρόβλημα Τριών Πεδίων σε $1 + 1$ Διαστάσεις . . . . .                       | 3         |
| 2.2      | Ολική Συνθήκη . . . . .                                                     | 5         |
| 2.3      | Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης . . . . .                               | 7         |
| 2.4      | Αριθμητικοί Υπολογισμοί . . . . .                                           | 12        |
| 2.4.1    | Αναλυτικές εκφράσεις για τα ολοκληρώματα των Gaussian συναρτήσεων . . . . . | 12        |
| 2.4.2    | Μονοπάτια ολοκλήρωσης . . . . .                                             | 13        |
| 2.4.3    | Αλγεβρικές Ιδιότητες Ολοκληρωμάτων . . . . .                                | 14        |
| 2.5      | Σύγκλιση . . . . .                                                          | 16        |
| <b>3</b> | <b>Παραδοτέα</b>                                                            | <b>20</b> |
| <b>4</b> | <b>Συνεργασίες</b>                                                          | <b>20</b> |
| <b>5</b> | <b>Μελλοντικές Δράσεις</b>                                                  | <b>20</b> |

# 1 Σκοπός

Την περίοδο αυτή ολοκληρώθηκε η ανάπτυξη νέου φορμαλισμού ώστε να επεκταθεί η μέθοδος Φωκά και να συμπεριλάβει γραμμικές ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης. Αντιμετωπίστηκαν με επιτυχία τα προβλήματα που παρουσιάζονται στις διεπαφές και κατέστη δυνατό να βρεθεί σε κλειστή μορφή η λύση ενός προβλήματος τριών χωρικών πεδίων σε  $1 + 1$  διαστάσεις. Η τεχνική περιγραφή περιλαμβάνεται στις παραγράφους που ακολουθούν.

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Πρόβλημα Τριών Πεδίων σε $1 + 1$ Διαστάσεις

Έστω το παρακάτω αδιάστατο πρόβλημα αρχικών και συνοριακών τιμών (ΠΑΣΤ) :

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ c_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (1)$$

όπου αντικαθιστώντας

$$c(x, t) = e^t u(x, t) \quad (2)$$

καταλήγουμε στο

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x, & x \in [a, b], \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (3)$$

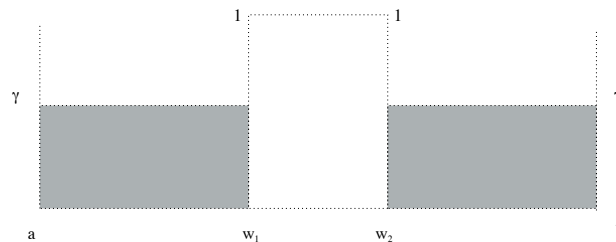
Ο συντελεστής διάχυσης  $D = D(x)$  είναι μια ασυνεχής συνάρτηση του  $x$  :

$$D = D(x) = \begin{cases} \gamma, & a \leq x < w_1 \\ 1, & w_1 \leq x < w_2 \\ \gamma, & w_2 \leq x \leq b \end{cases}, \quad (4)$$

όπου  $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < w_3 \equiv b$  μια διαμέριση, τριών περιοχών, του διαστήματος  $[a, b]$  και  $\gamma < 1$  (βλ. σχήμα 4).

Επίσης ως αρχική συνθήκη  $f(x)$  θα θεωρήσουμε την

$$f(x) := \delta(x - \xi), \quad \xi \in (a, b) \quad (5)$$



Σχήμα 1: Συντελεστής Διάχυσης

όπου  $\delta(x)$  η συνάρτηση δέλτα του Dirac.

Παρατηρήστε ότι ο ασυνεχής συντελεστής διάχυσης  $D(x)$  δηλώνει απευθείας ασυνέχεια της παραγώγου  $u_x$ , και επομένως συνέχεια του  $Du_x$ , πάνω σε κάθε σημείο διεπαφής ( $w_1$  και  $w_2$ ). Η γραμμική παραβολική φύση του προβλήματος αρχικών-συνοριακών συνθηκών (3) συνεπάγεται συνέχεια της  $u$  σε κάθε σημείο διεπαφής δηλαδή

$$[u] := u^+ - u^- = 0, \quad \text{στα } x = w_k, \quad k = 1, 2, \quad (6)$$

όπου

$$u^+ := \lim_{x \rightarrow w_k^+} u(x) \quad \text{και} \quad u^- := \lim_{x \rightarrow w_k^-} u(x).$$

Η ολοκλήρωση της εξίσωσης στο (3) γύρω από τα σημεία διασύνδεσης συνεπάγεται ότι:

$$[Du_x] := D^+ u_x^+ - D^- u_x^- = 0, \quad \text{στα } x = w_k, \quad k = 1, 2. \quad (7)$$

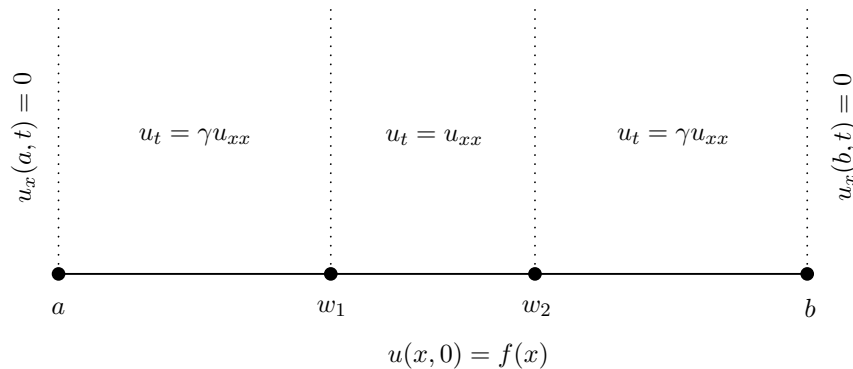
Λαμβάνοντας υπόψιν τους παραπάνω περιορισμούς συνέχειας (6)-(7) μπορούμε να περιγράψουμε εναλλακτικά το πρόβλημα μοντέλο (3) ως

$$\begin{cases} u_t = Du_{xx}, & x \in \mathcal{R}_\ell, \quad \ell = 1, 2, 3, \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \\ [u] = 0 \quad \text{και} \quad [Du_x] = 0 \quad \text{στα } x = w_k, \quad k = 1, 2 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (8)$$

όπου με  $\mathcal{R}_\ell$  δηλώνουμε τις περιοχές

$$\mathcal{R}_1 := [a, w_1], \quad \mathcal{R}_2 := [w_1, w_2], \quad \mathcal{R}_3 := [w_2, b]. \quad (9)$$

Στο σχήμα 2 δίδεται μια γραφική αναπαράσταση του προβλήματος. Το πρόβλημα θεωρείται πολλαπλών πεδίων αφού σε κάθε περιοχή η προς επίλυση μερική διαφορική εξίσωση είναι διαφορετική.



Σχήμα 2: Το πρόβλημα μοντέλο

## 2.2 Ολική Συνθήκη

Έστω  $u_\ell(x, t)$ ,  $\ell = 1, 2, 3$  η λύση του προβλήματος μοντέλου (8) στην περιοχή  $\mathcal{R}_\ell$ ,  $\ell = 1, 2, 3$ . Προφανώς οι περιορισμοί (6)-(7) γράφονται ισοδύναμα ως:

$$u_1(w_1, t) = u_2(w_1, t) \quad (10)$$

$$\gamma u_{1x}(w_1, t) = u_{2x}(w_1, t) \quad (11)$$

$$u_2(w_2, t) = u_3(w_2, t) \quad (12)$$

$$u_{2x}(w_2, t) = \gamma u_{3x}(w_2, t) \quad (13)$$

Η μέθοδος μετασχηματισμού Φωκά χρησιμοποιεί την *divergent μορφή* μιας διαφορικής εξίσωσης για να παράξει την επανομαζόμενη *Ολική Συνθήκη (Global Relation)* η οποία χρησιμοποιείται στην συνέχεια για να οδηγηθούμε στην ολοκληρωτική μορφή της λύσης. Σε αυτή την κατεύθυνση παρατηρούμε ότι η  $u_1(x, t)$  ικανοποιεί την εξίσωση

$$u_{1t} = \gamma u_{1xx} \quad , \quad x \in \mathcal{R}_1 \quad (14)$$

ενώ η formal adjoint της  $u_1^*(x, t)$  ικανοποιεί την

$$-u_{1t}^* = \gamma u_{1xx}^* \quad , \quad x \in \mathcal{R}_1 \quad (15)$$

Πολλαπλασιάζοντας τις (14) και (15) με τις  $u_1^*$  και  $u_1$ , αντίστοιχα, και αφαιρώντας τις παραγόμενες εξισώσεις καταλήγουμε στην

$$(u_1 u_1^*)_t - \gamma (u_1^* u_{1x} - u_1 u_{1x}^*)_x = 0 \quad (16)$$

Λαμβάνοντας υπόψιν ότι μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (15) δίνεται από την

$$u_1^*(x, t; k) = e^{-ikx + \gamma k^2 t}, \quad k \in \mathbb{C}, \quad (17)$$

η εξίσωση (16) γίνεται

$$\left[ e^{-ikx + \gamma k^2 t} u_1 \right]_t - \left[ e^{-ikx + \gamma k^2 t} \gamma (u_{1x} + i\kappa u_1) \right]_x = 0 \quad (18)$$

η οποία είναι και η *divergence μορφή* της διαφορικής εξίσωσης (14). Ολοκληρώνοντας στο χώρο και στο χρόνο έχουμε

$$\begin{aligned} & \int_a^{w_1} \int_0^t \left[ e^{-ikx + \gamma k^2 \tau} u_1(x, \tau) \right]_\tau d\tau dx - \\ & - \int_0^t \int_a^{w_1} \left[ e^{-ikx + \gamma k^2 \tau} \gamma (u_{1x}(x, \tau) + i\kappa u_1(x, \tau)) \right]_x dx d\tau = 0 \quad \Leftrightarrow \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \Leftrightarrow & \int_a^{w_1} e^{-ikx + \gamma k^2 t} u_1(x, t) dx - \int_a^{w_1} e^{-ikx} u_1(x, 0) dx - \\ & - \int_0^t \gamma e^{-ikw_1 + \gamma k^2 \tau} u_{1x}(w_1, \tau) d\tau - \int_0^t i\kappa \gamma e^{-ikw_1 + \gamma k^2 \tau} u_1(w_1, \tau) d\tau + \\ & + \int_0^t \gamma e^{-ika + \gamma k^2 \tau} u_{1x}(a, \tau) d\tau + \int_0^t i\kappa \gamma e^{-ika + \gamma k^2 \tau} u_1(a, \tau) d\tau = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

Μπορούμε να ορίσουμε τον ευθύ μετασχηματισμό Fourier της  $u_\ell(x, t)$  με

$$\widehat{u}_\ell(k, t) = \int_{l_\ell}^{r_\ell} e^{-ikx} u_\ell(x, t) dx \quad k \in \mathbb{C}, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (21)$$

και τον αντίστροφο μετασχηματισμό Fourier με

$$u_\ell(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \widehat{u}_\ell(k, t) dk, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (22)$$

όπου  $l_\ell$  και  $r_\ell$  δηλώνουν το αριστερό και το δεξί άκρο των περιοχών  $\mathcal{R}_\ell$ . Επίσης αν ορίσουμε

$$\tilde{u}_\ell(x, \gamma k^2) := \int_0^t e^{\gamma k^2 \tau} u_\ell(x, \tau) d\tau \quad \ell = 1, 3 \quad (23)$$

$$\tilde{u}_2(x, k^2) := \int_0^t e^{k^2 \tau} u_2(x, \tau) d\tau \quad (24)$$

και

$$\tilde{u}_{\ell x}(x, \gamma k^2) := \int_0^t e^{\gamma k^2 \tau} u_{\ell x}(x, \tau) d\tau \quad \ell = 1, 3 \quad (25)$$

$$\tilde{u}_{2x}(x, k^2) := \int_0^t e^{k^2 \tau} u_{2x}(x, \tau) d\tau \quad (26)$$

η εξίσωση (20) γίνεται η **Ολική Συνθήκη** για την περιοχή  $\mathcal{R}_1$ :

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_1(k, t) = \hat{f}_1(k) + \gamma e^{-ikw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, \gamma k^2)] - \gamma e^{-ika} [\tilde{u}_{1x}(a, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_1(a, \gamma k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (27)$$

με

$$\hat{f}_\ell(r) = \int_{l_\ell}^{r_\ell} e^{-irx} f_\ell(x) dx \quad (28)$$

όπου η  $f_\ell$  δηλώνει την αρχική συνθήκη  $u(x, 0)$  στην περιοχή  $\mathcal{R}_\ell$ ,  $\ell = 1, 2, 3$ .

## 2.3 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης

Δουλεύοντας με παρόμοιο τρόπο, οι ολικές συνθήκες για τις περιοχές  $\mathcal{R}_2$  και  $\mathcal{R}_3$  είναι οι

$$e^{k^2 t} \hat{u}_2(k, t) = \hat{f}_2(k) + e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{-ikw_1} [\tilde{u}_{2x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (29)$$

και

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_3(k, t) = \hat{f}_3(k) + \gamma e^{-ikb} [\tilde{u}_{3x}(b, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_3(b, \gamma k^2)] - \gamma e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{3x}(w_2, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_3(w_2, \gamma k^2)], \quad k \in \mathbb{C}. \quad (30)$$

Επιπρόσθετα, λαμβάνοντας υπόψιν τους περιορισμούς (10)-(13) και τις συνοριακές συνθήκες  $u_x(a, t) = 0$  και  $u_x(b, t) = 0$ , οι παραπάνω ολικές συνθήκες γίνονται:

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_1(k, t) = \hat{f}_1(k) + \gamma e^{-ikw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, \gamma k^2)] - \gamma e^{-ika} ik\tilde{u}_1(a, \gamma k^2), \quad k \in \mathbb{C} \quad (31)$$

$$e^{k^2 t} \hat{u}_2(k, t) = \hat{f}_2(k) + e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{-ikw_1} [\gamma \tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (32)$$

$$e^{\gamma k^2 t} \hat{u}_3(k, t) = \hat{f}_3(k) + \gamma e^{-ikb} ik\tilde{u}_3(b, \gamma k^2) - \gamma e^{-ikw_2} [\frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, \gamma k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, \gamma k^2)], \quad k \in \mathbb{C}. \quad (33)$$

Εάν στις σχέσεις (31) και (33), θέσουμε  $\lambda^2 = \gamma k^2$  και  $c = \gamma^{-\frac{1}{2}}$  και μετονομάσουμε το  $\lambda$  σε  $k$  οι παραπάνω σχέσεις παίρνουν την μορφή:

$$e^{k^2 t} \hat{u}_1(ck, t) = \hat{f}_1(ck) + \gamma e^{-ickw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] - \gamma e^{-icka} ick\tilde{u}_1(a, k^2), \quad k \in \mathbb{C} \quad (34)$$

$$e^{k^2 t} \hat{u}_2(k, t) = \hat{f}_2(k) + e^{-ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{-ikw_1} [\gamma \tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (35)$$

$$e^{k^2 t} \hat{u}_3(ck, t) = \hat{f}_3(ck) + \gamma e^{-ickb} ick\tilde{u}_3(b, k^2) - \gamma e^{-ickw_2} [\frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ick\tilde{u}_2(w_2, k^2)], \quad k \in \mathbb{C}. \quad (36)$$

Αντιστρέφοντας τον μετασχηματισμό Fourier στις εξισώσεις (34)-(36) παίρνουμε τις ολοκληρωτικές αναπαραστάσεις των λύσεων  $u_\ell(x, t)$ ,  $\ell = 1, 2, 3$  αντίστοιχα:

$$u_1(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx} e^{-k^2 t} \hat{f}_1(ck) dk \quad (37\alpha')$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick(x-w_1)} e^{-k^2 t} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (37\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ick e^{ick(x-a)} e^{-k^2 t} \tilde{u}_1(a, k^2) dk \quad (37\gamma')$$

$$u_2(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-k^2t} \hat{f}_2(k) dk \quad (38\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-w_2)} e^{-k^2t} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] dk \quad (38\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-w_1)} e^{-k^2t} [\gamma\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (38\gamma')$$

$$u_3(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx-k^2t} \hat{f}_3(ck) dk \quad (39\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick(x-b)} e^{-k^2t} ik\tilde{u}_3(b, k^2) dk \quad (39\beta')$$

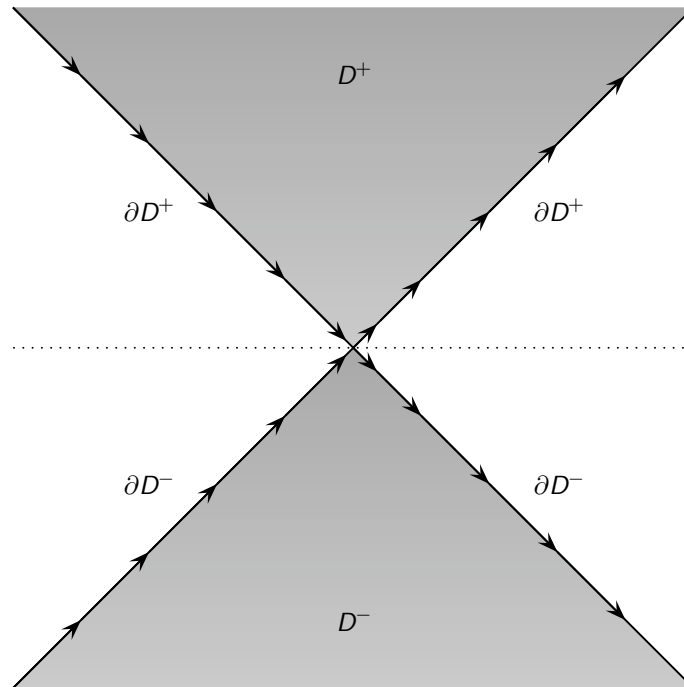
$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick(x-w_2)} e^{-k^2t} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right] dk \quad (39\gamma')$$

Η αναλυτικότητα των συναρτήσεων που εμπλέκονται στην ολοκληρωτική αναπαράσταση των λύσεων  $u_\ell(x, t)$ , μας επιτρέπει την αντικατάσταση του πραγματικού άξονα  $(-\infty, \infty)$  με άλλα μονοπάτια ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για να επιτύχουμε εκθετική, κατά απόλυτη τιμή, μείωση των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων όσο απομακρυνόμαστε από το μηδέν. Για παράδειγμα, στην ολοκληρωτική αναπαράσταση της  $u_1(x, t)$  στην (37), παρατηρούμε ότι:

- η ποσότητα  $e^{ick(x-w_1)}$  είναι αναλυτική και φραγμένη για  $Im(k) < 0$
- η ποσότητα  $e^{ick(x-a)}$  είναι αναλυτική και φραγμένη για  $Im(k) > 0$
- η ποσότητα  $e^{-k^2t}$  είναι αναλυτική και φραγμένη για  $Re(k^2) \geq 0$ .

Κατόπιν, βασιζόμενοι στον ορισμό των χωρίων  $D$ ,  $D^+$  και  $D^-$  (δες επίσης το γράφημα 3)

$$D = \{k \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} k^2 < 0\} = \{k \in \mathbb{C} : \arg k \in \{(\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}) \cup (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\}\} \quad (40)$$



Σχήμα 3: Τα μονοπάτια ολοκλήρωσης  $\partial D^+$  και  $\partial D^-$

$$D^+ = \{k : \arg k \in (\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4})\} = D \cap \mathbb{C}^+ \quad (41)$$

$$D^- = \{k : \arg k \in (\frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4})\} = D \cap \mathbb{C}^- \quad (42)$$

μπορούμε ισοδύναμα να εκφράσουμε (δες επίσης [8]) την ολοκληρωτική αναπαράσταση των  $u_\ell(x, t)$  ως:

$$u_1(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx} e^{-k^2 t} \widehat{f}_1(ck) dk \quad (43\alpha')$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{\partial D^-} e^{ick(x-w_1)} e^{-k^2 t} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (43\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^+} ick e^{ick(x-a)} e^{-k^2 t} \tilde{u}_1(a, k^2) dk \quad (43\gamma')$$

$$u_2(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx-k^2t} \hat{f}_2(k) dk \quad (44\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^-} e^{ik(x-w_2)} e^{-k^2t} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] dk \quad (44\beta')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^+} e^{ik(x-w_1)} e^{-k^2t} [\gamma\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) + ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)] dk \quad (44\gamma')$$

$$u_3(x, t) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ickx-k^2t} \hat{f}_3(ck) dk \quad (45\alpha')$$

$$- \frac{1}{2\pi} \int_{\partial D^-} e^{ick(x-b)} e^{-k^2t} ik\tilde{u}_3(b, k^2) dk \quad (45\beta')$$

$$- \frac{1}{2c\pi} \int_{\partial D^+} e^{ick(x-w_2)} e^{-k^2t} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) + ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right] dk \quad (45\gamma')$$

Για να προσδιορίσουμε τις ποσότητες  $\tilde{u}_1(a, k^2)$ ,  $\tilde{u}_1(w_1, k^2)$ ,  $\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2)$ ,  $\tilde{u}_2(w_2, k^2)$ ,  $\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2)$ ,  $\tilde{u}_3(b, k^2)$  αντικαθιστούμε το  $k$  με  $-k$  στις εξισώσεις (34)-(36) και παίρνουμε:

$$e^{k^2t} \hat{u}_1(-ck, t) = \hat{f}_1(-ck) + \gamma e^{ickw_1} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) - ick\tilde{u}_1(w_1, k^2)] + \gamma e^{icka} ick\tilde{u}_1(a, k^2), \quad k \in \mathbb{C} \quad (46)$$

$$e^{k^2t} \hat{u}_2(-k, t) = \hat{f}_2(-k) + e^{ikw_2} [\tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) - ik\tilde{u}_2(w_2, k^2)] - e^{ikw_1} [\gamma\tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) - ik\tilde{u}_1(w_1, k^2)], \quad k \in \mathbb{C} \quad (47)$$

$$e^{k^2t} \hat{u}_3(-ck, t) = \hat{f}_3(-ck) - \gamma e^{ickb} ick\tilde{u}_3(b, k^2) - \gamma e^{ickw_2} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) - ick\tilde{u}_2(w_2, k^2) \right], \quad k \in \mathbb{C} \quad (48)$$

Οι εξισώσεις (34), (46), (35), (47), (36), (48) ορίζουν το γραμμικό σύστημα

$$G\tilde{u} = f \quad (49)$$

όπου

$$G = \begin{bmatrix} ick\gamma e^{-icka} & -\gamma ick e^{-ickw_1} & -\gamma e^{-ickw_1} & & & \\ -ick\gamma e^{icka} & \gamma ick e^{ickw_1} & -\gamma e^{ickw_1} & & & \\ & ike^{-ikw_1} & \gamma e^{-ikw_1} & -ike^{-ikw_2} & -e^{-ikw_2} & \\ & -ike^{ikw_1} & e^{ikw_1}\gamma & ike^{ikw_2} & -e^{ikw_2} & \\ & & & e^{-ickw_2} ick\gamma & e^{-ickw_2} & -ick\gamma e^{-ickb} \\ & & & -e^{ickw_2} ick\gamma & e^{ickw_2} & ick\gamma e^{ickb} \end{bmatrix}, \quad (50)$$

$$\tilde{u} = \begin{bmatrix} \tilde{u}_1(a, k^2) \\ \tilde{u}_1(w_1, k^2) \\ \tilde{u}_{1x}(w_1, k^2) \\ \tilde{u}_2(w_2, k^2) \\ \tilde{u}_{2x}(w_2, k^2) \\ \tilde{u}_3(b, k^2) \end{bmatrix}, \quad \text{και} \quad f = \begin{bmatrix} \hat{f}_1(ck) \\ \hat{f}_1(-ck) \\ \hat{f}_2(k) \\ \hat{f}_2(-k) \\ \hat{f}_3(ck) \\ \hat{f}_3(-ck) \end{bmatrix} - e^{k^2 t} \begin{bmatrix} \hat{u}_1(ck, t) \\ \hat{u}_1(-ck, t) \\ \hat{u}_2(k, t) \\ \hat{u}_2(-k, t) \\ \hat{u}_3(ck, t) \\ \hat{u}_3(-ck, t) \end{bmatrix} \quad (51)$$

Η λύση του παραπάνω γραμμικού συστήματος μας δίνει τις άγνωστες ποσότητες.

### Παρατήρηση 1

Οι όροι  $\hat{u}_\ell(\pm ck, t)$  θα παραληφθούν από το σύστημα (49), κατά την επίλυσή του, καθώς η συνεισφορά των  $\frac{\hat{u}_\ell(\pm ck, t)}{\det(G)}$  είναι μηδενική ([10]).

## 2.4 Αριθμητικοί Υπολογισμοί

Έχοντας ως στόχο την ανάπτυξη αποδοτικών μεθόδων ολοκλήρωσης, σε αυτή την παράγραφο υπογραμμίζουμε τις ιδιότητες των ολοκληρωμάτων στις σχέσεις (43)-(45) και αναζητούμε κατάλληλα μονοπάτια ολοκλήρωσης στο μιγαδικό επίπεδο για τον αριθμητικό υπολογισμό των ολοκληρωμάτων.

### 2.4.1 Αναλυτικές εκφράσεις για τα ολοκληρώματα των Gaussian συναρτήσεων

Σύμφωνα με τους ορισμούς (5) και (28) έχουμε ότι

$$f_\ell(x) = \begin{cases} \delta(x - \xi) & , \quad \xi \in \mathcal{R}_\ell \\ 0 & , \quad \text{αλλιώς} \end{cases}, \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (52)$$

και

$$\hat{f}_\ell(\lambda k) = \begin{cases} e^{-i\lambda k \xi} & , \quad \xi \in \mathcal{R}_\ell \\ 0 & , \quad \text{αλλιώς} \end{cases} \quad (53)$$

οπότε τα πρώτα ολοκληρώματα στις (43)-(45) υπολογίζονται αναλυτικά ως

$$u_{\ell a}(x, t) := \frac{\lambda}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda k x} e^{-k^2 t} \widehat{f}_{\ell}(\lambda k) dk =$$

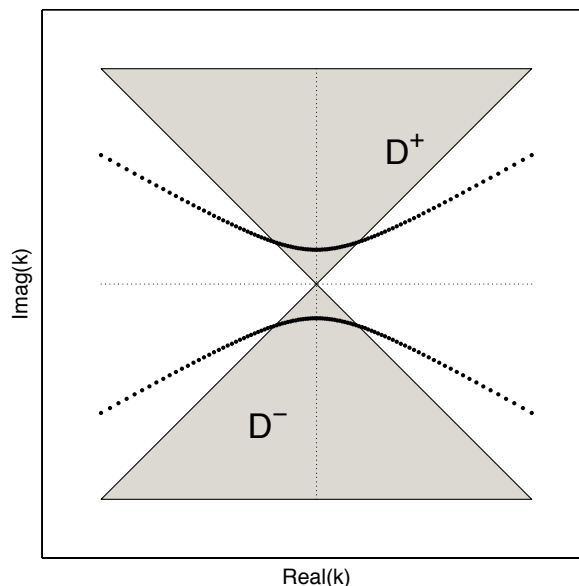
$$= \begin{cases} \frac{\lambda}{2\sqrt{t\pi}} e^{-\frac{\lambda^2(\xi-x)^2}{4t}} & , \quad \xi \in \mathcal{R}_{\ell} \\ 0 & , \quad \text{αλλού} \end{cases} \quad (54)$$

με  $\lambda = c$  όταν  $\ell = 1, 3$  και  $\lambda = 1$  όταν  $\ell = 2$ .

## 2.4.2 Μονοπάτια ολοκλήρωσης

Είναι γνωστό ([16]) ότι ένας τρόπος για τον αποδοτικό υπολογισμό ολοκληρωμάτων που περιέχουν όρους της μορφής  $e^z$  είναι να εφαρμόσουμε τον κανόνα του τραπεζίου σε ένα κατάλληλα επιλεγμένο μονοπάτι Hankel. Οι υπερβολές, μια κλάση τέτοιων μονοπατιών, είναι απλές καμπύλες που έχουν ασύμπτωτες και είναι μια φυσική επιλογή μονοπατιών ολοκλήρωσης. Για να ορίσουμε τις υπερβολές (δες επίσης [4], [9]) αντιστοιχούμε τα σημεία  $\theta$  του πραγματικού άξονα στα σημεία  $\pm k(\theta)$  του μιγαδικού επιπέδου χρησιμοποιώντας την αναλυτική συνάρτηση:

$$k_{\theta} \equiv k(\theta) := i \sin(\beta - i\theta). \quad (55)$$



Σχήμα 4: Οι υπερβολές για  $\beta = \pi/6$

Προφανώς οι καμπύλες  $k(\theta)$  και  $-k(\theta)$  αντικαθιστούν τα μονοπάτια ολοκλήρωσης  $\partial D^+$  και  $\partial D^-$  αντίστοιχα. Χρησιμοποιώντας αυτές τις υπερβολές στις (43)-(45), οι ολοκληρωτικές αναπαραστάσεις των λύσεων  $u_\ell(x, t)$  παίρνουν τη μορφή:

$$u_\ell(x, t) = u_{\ell a}(x, t) + u_{\ell b}(x, t) + u_{\ell c}(x, t) \quad , \quad \ell = 1, 2, 3 \quad (56)$$

όπου  $u_{\ell a}$  όπως έχει οριστεί στην (54), και

$$\begin{aligned} u_{1b}(x, t) &= + \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick_\theta(w_1-x)} e^{-k_\theta^2 t} [\tilde{u}_{1x}(w_1, k_\theta^2) - ick_\theta \tilde{u}_1(w_1, k_\theta^2)] k'_\theta d\theta \\ u_{2b}(x, t) &= + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_\theta(w_2-x)} e^{-k_\theta^2 t} [\tilde{u}_{2x}(w, k_\theta^2) - ik_\theta \tilde{u}_2(w_2, k_\theta^2)] k'_\theta d\theta \\ u_{3b}(x, t) &= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick_\theta(b-x)} e^{-k_\theta^2 t} ik_\theta \tilde{u}_3(b, k_\theta^2) k'_\theta d\theta \\ u_{1c}(x, t) &= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} ik_\theta e^{ick_\theta(x-a)} e^{-k_\theta^2 t} \tilde{u}_1(a, k_\theta^2) k'_\theta d\theta \\ u_{2c}(x, t) &= - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik_\theta(x-w_1)} e^{-k_\theta^2 t} [\gamma \tilde{u}_{1x}(w_1, k_\theta^2) + ik_\theta \tilde{u}_1(w_1, k_\theta^2)] k'_\theta d\theta \end{aligned} \quad (57)$$

$$u_{3c}(x, t) = - \frac{1}{2c\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ick_\theta(x-w_2)} e^{-k_\theta^2 t} \left[ \frac{1}{\gamma} \tilde{u}_{2x}(w_2, k_\theta^2) + ick_\theta \tilde{u}_2(w_2, k_\theta^2) \right] k'_\theta d\theta \quad (58)$$

με το  $k'_\theta$  να δηλώνει την παράγωγο του  $k(\theta)$  ως προς  $\theta$

$$k'_\theta = \cos(\beta - i\theta). \quad (59)$$

Με αυτή την επιλογή μονοπατιών ολοκλήρωσης επιτυγχάνουμε γρήγορη μείωση, κατά μέτρο, των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων όπως φαίνεται στα σχήματα (5) και (7) για τα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$ .

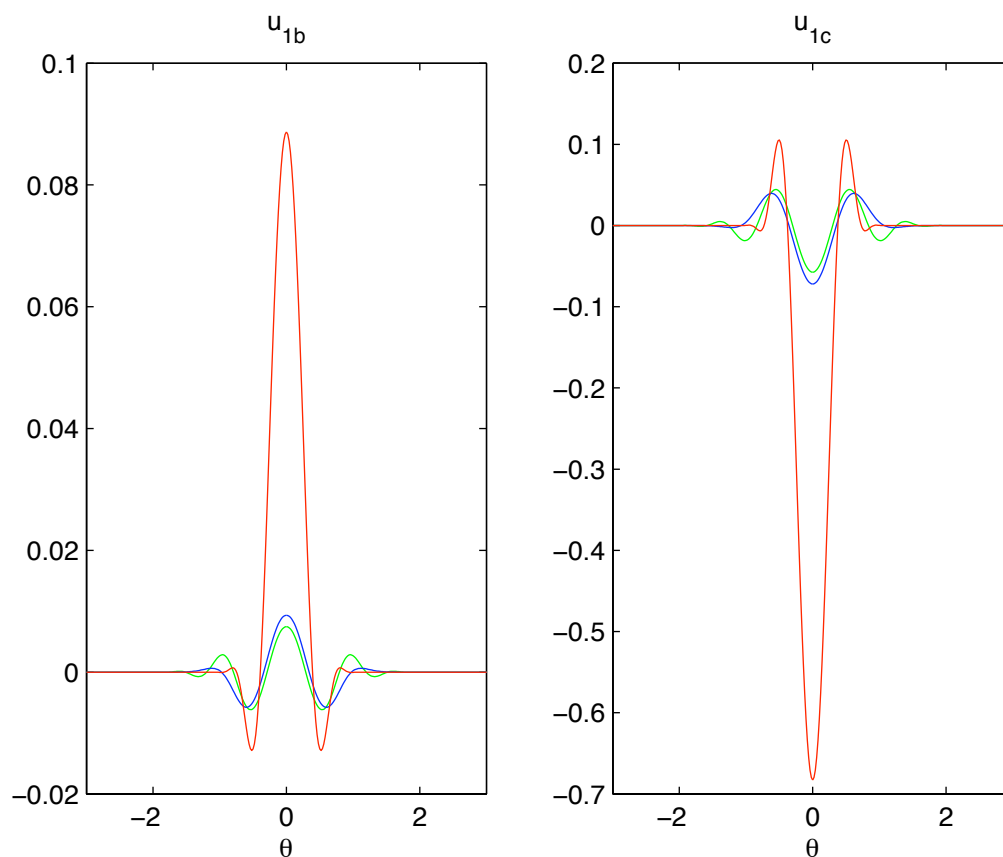
### 2.4.3 Αλγεβρικές Ιδιότητες Ολοκληρωμάτων

Για τον αποδοτικό υπολογισμό όλων των παραπάνω ολοκληρωμάτων πρέπει να λάβουμε υπόψιν τις παρακάτω βασικές ιδιότητες:

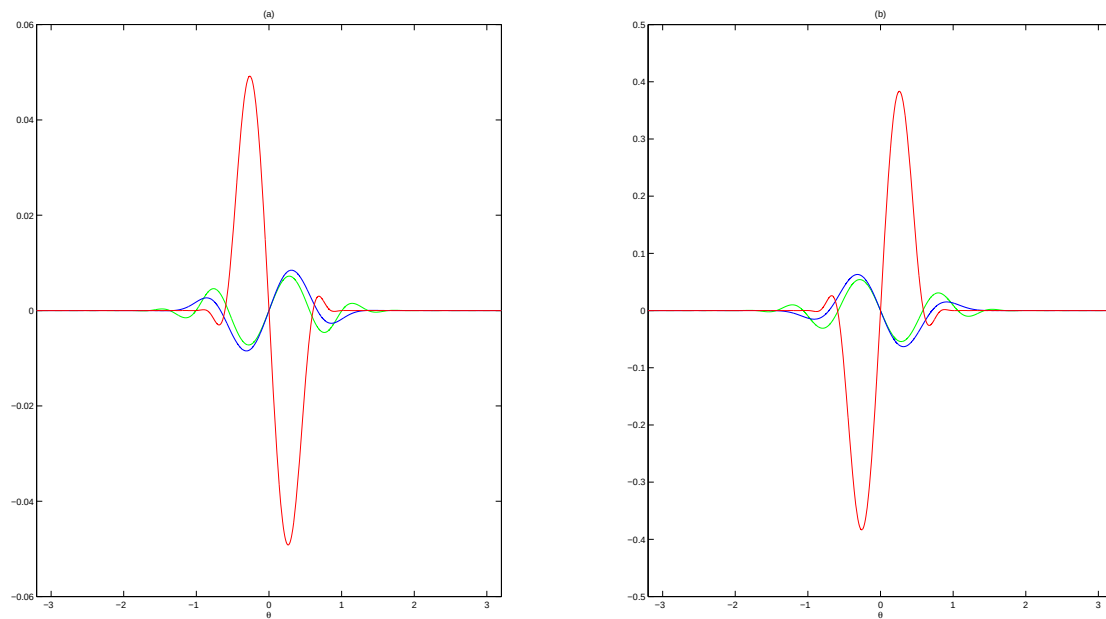


- Τα πραγματικά μέρη όλων των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι *άρτιες* συναρτήσεις του  $\theta$ .
- Τα φανταστικά μέρη όλων των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων είναι *περιττές* συναρτήσεις του  $\theta$ .
- Οι προς ολοκλήρωση ποσότητες είναι φθίνουσες συναρτήσεις του  $\theta$ .

Η απόδειξη των δυο πρώτων ιδιοτήτων υπάρχει στο [8] ενώ η τρίτη ιδιότητα είναι άμεση συνέπεια των επιλεγμένων μονοπατιών ολοκλήρωσης. Αυτές οι ιδιότητες παρουσιάζονται εποπτικά στα σχήματα (5), (6) και (7) για τα ολοκληρώματα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$ .



Σχήμα 5: Τα πραγματικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων στα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$  για  $x = -\pi$  και για διάφορες τιμές του  $t$ . Πράσινο για  $t = 0.1$ , μπλέ για  $t = 1$  και κόκκινο για  $t = 10$ .



Σχήμα 6: Τα φανταστικά μέρη των προς ολοκλήρωση ποσοτήτων στα  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$  ολοκληρώματα για  $x = -\pi$  και  $t = 0.1$  (πράσινο),  $t = 1$  (μπλε),  $t = 10$  (κόκκινο).

Η εφαρμογή αυτών των ιδιοτήτων συνεπάγεται ότι

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(\theta) d\theta = 2 \int_0^{\infty} \operatorname{Re}(U(\theta)) d\theta \approx 2 \int_0^R \operatorname{Re}(U(\theta)) d\theta,$$

όπου η  $U(\theta)$  συμβολίζει οποιαδήποτε από τις προς ολοκλήρωση ποσότητες και  $R$  είναι ένας σχετικά μικρός πραγματικός αριθμός. Για μια εκτίμηση του  $R$  μπορούμε να απαιτήσουμε ο κυρίαρχος εκθετικός όρος  $e^{-k_{\theta}^2 t}$ , που εμφανίζεται σε όλα τα ολοκληρώματα, να ικανοποιεί την

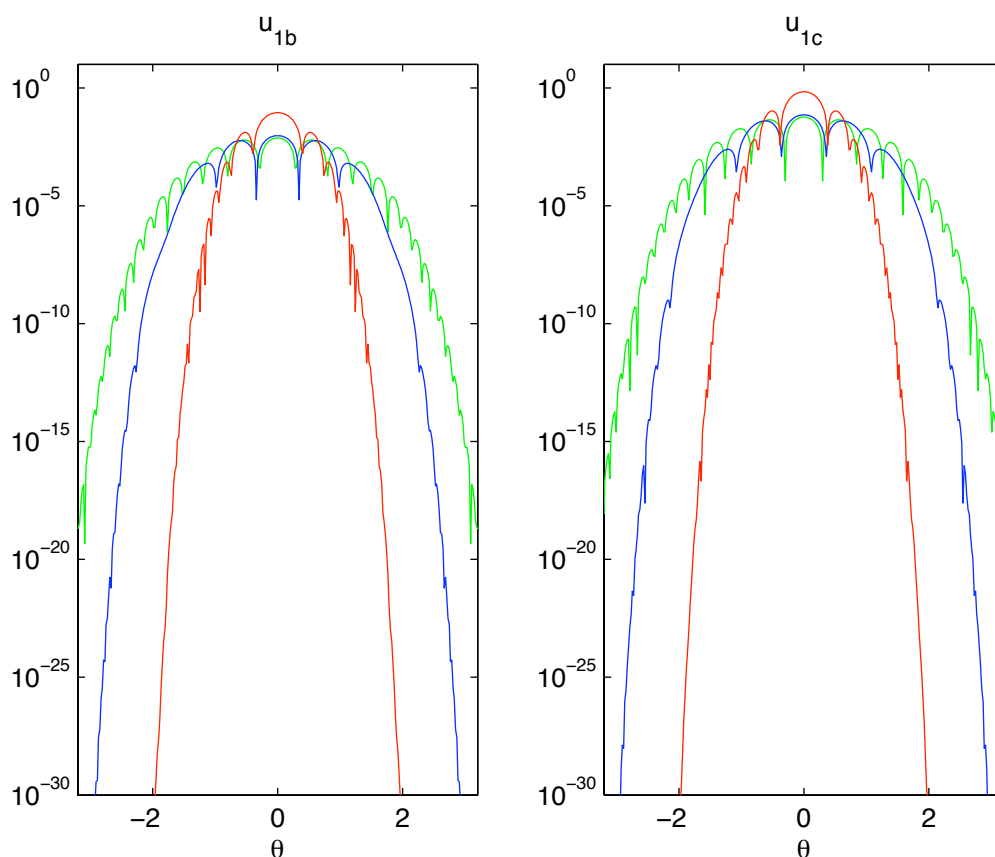
$$\left| e^{-k_{\theta}^2 t} \right| \leq 10^{-M} \text{ για όλα } \theta \geq R \equiv R(t; M)$$

για ικανά μεγάλο  $M$ , επομένως

$$R = \frac{1}{2} \ln \frac{4t + 8M \ln 10}{t}. \quad (60)$$

## 2.5 Σύγκλιση

Η σύγκλιση της διαδικασίας της αριθμητικής ολοκλήρωσης επηρεάζεται κυρίως από την επιλογή της παραμέτρου  $R$ , η οποία καθορίζει τα όρια ολοκλήρωσης, και από το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης  $N$ . Για να ερευνήσουμε την

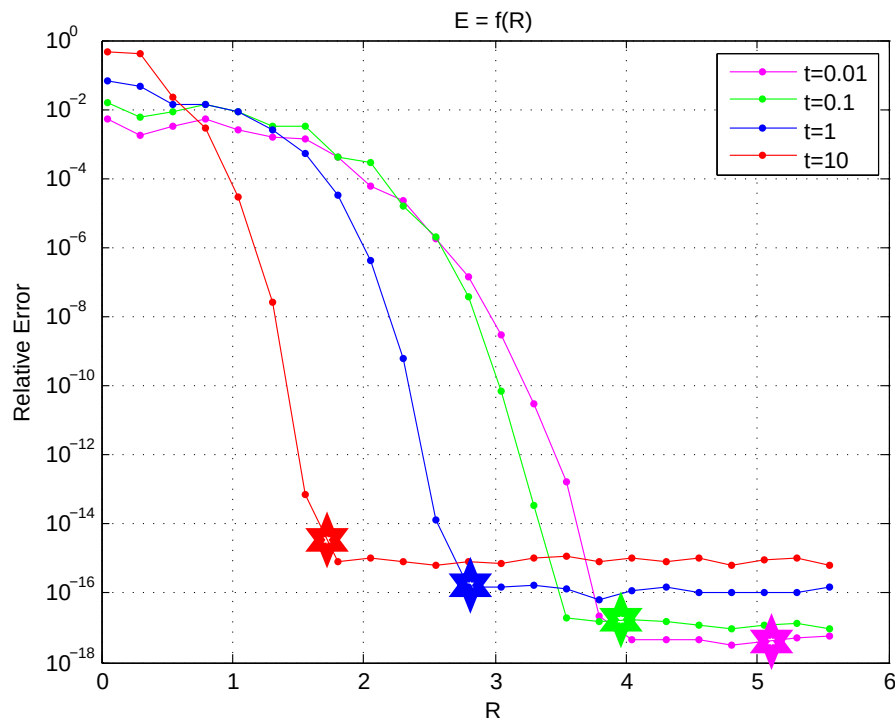


Σχήμα 7: Οι προς ολοκλήρωση ποσότητες, (η απόλυτη τιμή των πραγματικών τους μερών σε λογαριθμική κλίμακα) των  $u_{1b}$  και  $u_{1c}$  για  $x = -\pi$  και για διαφορετικές τιμές του  $t$ . Πράσινο για  $t = 0.1$ , μπλέ για  $t = 1$  και κόκκινο για  $t = 10$ .

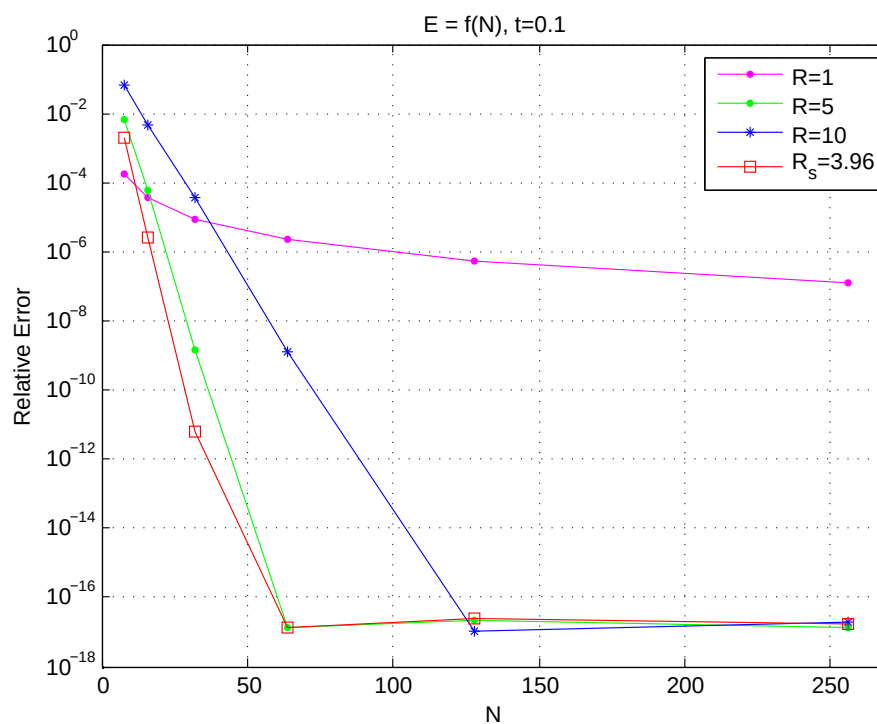
εξάρτηση από την παράμετρο  $R$  χρησιμοποιούμε το σχετικό σφάλμα  $E_R$ , που ορίζεται ως:

$$E_R := \frac{\|U_{R_i} - U_{R_{i+1}}\|_{\infty}}{\|U_{R_{i+1}}\|_{\infty}}, \quad (61)$$

όπου  $U_{R_i}$  δηλώνει το διάνυσμα των προσεγγίσεων  $\hat{u}(\bar{x}_j, \bar{t}; R_i)$ ,  $j = 1, \dots, M$  της λύσης  $u(x, t)$  που παράγονται χρησιμοποιώντας τα  $-R_i, R_i$  σαν όρια ολοκλήρωσης σε όλα τα ολοκληρώματα. Διατηρώντας το  $N$  σταθερό σε ένα αρκετά ικανό πλήθος σημείων ολοκλήρωσης ( $N \geq 64$ ), το σχετικό σφάλμα  $E_R$  φαίνεται στο σχήμα (8). Παρατηρείται ότι υπάρχει μια βέλτιστη τιμή  $R_{opt}$  τέτοια ώστε το σχετικό σφάλμα  $E_R$  παραμένει πρακτικά το ίδιο για όλα τα  $R \geq R_{opt}$ . Η τιμή  $R = R_s$ , που παίρνουμε χρησιμοποιώντας την σχέση (60) και που φαίνεται σχηματικά με ένα "αστέρι" στο σχήμα (8), είναι σαφώς μια καλή προσέγγιση του  $R_{opt}$ .



Σχήμα 8: Το σχετικό σφάλμα  $E_R$  για διαφορετικές τιμές του χρόνου ( $t$ )



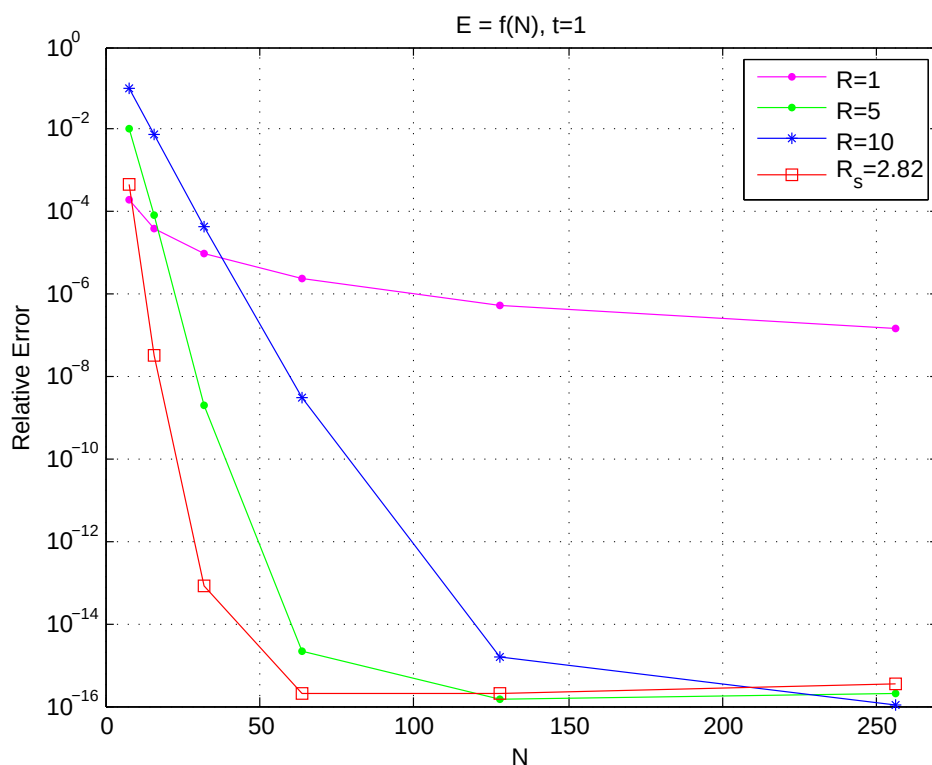
Σχήμα 9: Το σχετικό σφάλμα  $E_N$  για  $t = 0.1, 1$  και διαφορετικές τιμές του  $R$ .

Για να ερευνήσουμε την εξάρτηση από το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης  $N$ , ορίζουμε το σχετικό σφάλμα  $E_N$  ως:

$$E_N := \frac{\|U_{N_i} - U_{N_{i+1}}\|_\infty}{\|U_{N_{i+1}}\|_\infty} \quad (62)$$

όπου το  $U_{N_i}$  δηλώνει το διάνυσμα των προσεγγίσεων  $\hat{u}(\bar{x}_j, \bar{t}; N_i)$ ,  $j = 1, \dots, M$  της λύσης  $u(x, t)$  που παράγεται χρησιμοποιώντας  $N_i$  σημεία ολοκλήρωσης για τον αριθμητικό υπολογισμό όλων των ολοκληρωμάτων.

Στα σχήματα (9) και (10) παρατηρούμε την ταχεία σύγκλιση όταν  $R = R_s$ , (η τιμή που αποκτήσαμε χρησιμοποιώντας την σχέση (60)). Παρόμοια συμπεριφορά παρατηρείται για όλες τις τιμές του  $R$  σε μια γειτονιά του  $R_{opt}$ . Σε αυτές τις περιπτώσεις το σφάλμα πέφτει εκθετικά φθάνοντας το  $10^{-14}$  για  $N \geq 64$ . Εν αντιθέσει, για  $R < R_{opt}$  η σύγκλιση είναι αργή.



Σχήμα 10: Το σχετικό σφάλμα  $E_N$  για  $t = 0.1, 1$  και διαφορετικές τιμές του  $R$ .

Συμπερασματικά μπορούμε να πούμε ότι μια καλή εκτίμηση του  $R_{opt}$ , όπως αυτή που μας δίνει η σχέση (60), συνδυαζόμενη με ένα απλό προσαρμοστικό κανόνα ολοκλήρωσης μπορεί να μας δώσει μια προσεγγιστική μέθοδο υψηλού βαθμού σύγκλισης.

### 3 Παραδοτέα

- Παπαδομανωλάκη Μαρία, " Η μέθοδος Collocation για παραβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης: στην κατεύθυνση προσομοίωσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου." Διδακτορική Διατριβή 2012.
- Δ. Μαντζαβίνος, Μ. Παπαδομανωλάκη, Ι. Σαριδάκης, Α. Σηφαλάκης "Fokas transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions", Applied Numerical Mathematics, doi:10.1016/j.apnum.2014.09.006
- Επιστημονική Διάλεξη στα πλαίσια του Διεθνούς Συνεδρίου NumAn2012 (Ιωάννινα, Σεπτέμβριος 2012)

### 4 Συνεργασίες

Για τα ερευνητικά αποτελέσματα της παρούσα περιόδου η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Σηφαλάκη Αναστάση και Μ. Παπαδομανωλάκη συνεργάστηκε με τον καθηγητή Α. Φωκά και τον υποψήφιο διδάκτορα Δ. Μαντζαβίνο του Πανεπιστημίου Cambridge.

### 5 Μελλοντικές Δράσεις

Επέκταση της μεθόδου Φωκά σε  $N$  περιοχές στις  $1 + 1$  διαστάσεις.

### Αναφορές

- [1] M J Ablowitz και A S Fokas, Introduction and Applications of Complex Variables, *Cambridge University Press*, second edition 2003
- [2] P.K.Burgess, P.M.Kulesa, J.D.Murray, και E.C.Alvord Jr, The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas, *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*, 56(6):704-713, 1997.
- [3] G.C.Cruywagen, D.E.Woodward, P.Tracqui, G.T.Bartoo, J.D.Murray, και E.C.Alvord Jr, The modeling of diffusive tumours, *Journal of Biological Systems*, (3):937-945, 1995.



- [4] N.Flyer και A.S.Fokas, A hybrid analytical-numerical method for solving evolution partial differential equations.I. The half-line, *Proc.R.Soc.A*,464,1823-1849,2008.
- [5] A.S.Fokas A unified transform method for solving linear and certain nonlinear PDEs, *Proc.R.Soc.A*,453,1411-1443, 1997.
- [6] A.S.Fokas A new transform method for evolution PDEs, *IMA J. Appl. Math.*,67(6),559-590, 2002.
- [7] J.D. Murray, Mathematical Biology , *Springer-Verlag*, 3rd Edition 2002.
- [8] Παπαδομανωλάκη Μαρία, " Η μέθοδος Collocation για παραβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης: στην κατεύθυνση προσομοίωσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου." Διδακτορική Διατριβή 2012.
- [9] T.S. Papatheodorou και A.N.Kandili, Novel numerical techniques based on Fokas transforms, for the solution of initial boundary value problems,*Journal of Computational and Applied Mathematics* 227:75-82,2009.
- [10] D.A. Smith, Well-posed two-point initial-boundary value problems with arbitrary boundary conditions, *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.*, doi:10.1017/S030500411100082X, 2011
- [11] K.R.Swanson, Mathematical modeling of the growth and control of tumors, *PHD Thesis, University of Washington*,1999.
- [12] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr και J.D.Murray, A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter, *Cell Proliferation*,33:317-329,2000.
- [13] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr και J.D.Murray, Virtual brain tumours(gliomas) enhance the reality of medical imaging and highlight inadequacies of current therapy, *British Journal of Cancer*,86:14-18,2002.
- [14] K.R.Swanson, C.Bridge, J.D.Murray και E.C.Alvord Jr, Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion, *J.Neurol.Sci*,216:1-10,2003.
- [15] P.Tracqui, G.C.CruywagenG, D.E.Woodward, T.Bartoo, J.D.Murray και E.C.Alvord Jr, A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth, *Cell Proliferation*,28:17-31,1995.

- [16] L.N. Trefethen, J.A.C Weideman, T.Schmelzer, Tablot quadratures and rational approximations, *BIT Numerical Mathematics*, 46:653-670, 2006.
- [17] J.A.C Weideman και L.N. Trefethen, Parabolic and hyperbolic contours for computing the Bromwich integral, *Math. Comput., Math. Comp.*, 76:1341-1356, 2007.
- [18] D.E.Woodward, J.Cook,P.Tracqui, G.C.Cruywagen, J.D.Murray και E.C.Alvord Jr, A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection, *Cell Proliferation*,29:269-288, 1996.

## Παράρτημα Ε΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1

# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 3.1

Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές

## Περιεχόμενα

|          |                                                                    |           |
|----------|--------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Σκοπός</b>                                                      | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Μεθοδολογία</b>                                                 | <b>3</b>  |
| 2.1      | Έρευνα Πεδίου . . . . .                                            | 3         |
| 2.2      | Ανασκόπηση Αρχιτεκτονικών Clusters . . . . .                       | 4         |
| 2.3      | Δοκιμαστική εγκατάσταση και λειτουργία πλατφόρμας FEniCS . . . . . | 7         |
| <b>3</b> | <b>Παραδοτέα</b>                                                   | <b>9</b>  |
| <b>4</b> | <b>Συνεργασίες</b>                                                 | <b>9</b>  |
| <b>5</b> | <b>Μελλοντικές Δράσεις</b>                                         | <b>10</b> |

# 1 Σκοπός

## 2 Μεθοδολογία

Κατά το παραπάνω χρονικό διάστημα έγινε ανασκόπηση της διεθνούς βιβλιογραφίας και μελέτη των μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλού πεδίου (Multi Domain) προκειμένου τα μέλη της ΚΕΟ3 να αποκτήσουν το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο κατανόησης των αριθμητικών μεθόδων επίλυσης του προβλήματος, οι οποίες θα υλοποιηθούν στα παραπάνω περιβάλλοντα. Επίσης, μελετήθηκαν οι μέθοδοι Collocation και Μετασχηματισμού Φωκά.

Ακολούθησε η ανασκόπηση λογισμικού ανοικτού (ελεύθερου) κώδικα (Open Source) αφενός για γλώσσες προγραμματισμού για παράλληλη υλοποίηση και αφετέρου για πλατφόρμες λογισμικού, που διαθέτουν υλοποιημένα εργαλεία για επίλυση PDEs και άλλες αριθμητικές μεθόδους.

### 2.1 Έρευνα Πεδίου

Καθώς ο παραλληλισμός σε διαφορετικά επίπεδα υπάρχει σχεδόν παντού στους σημερινούς υπολογιστές, κρίθηκε αναγκαία μια ανασκόπηση των ποικίλων μοντέλων για παράλληλο υπολογισμό, τα οποία έχουν εξελιχθεί τα τελευταία χρόνια. Ένα μοντέλο παράλληλου υπολογισμού αποτελείται από ένα μοντέλο παράλληλου προγραμματισμού και ένα αντίστοιχο μοντέλο κόστους [1]. Το μοντέλο παράλληλου προγραμματισμού περιγράφει μια θεωρητική παράλληλη μηχανή με τις βασικές λειτουργίες της (όπως αριθμητικούς υπολογισμούς, δημιουργία εργασιών, διάβασμα ή εγγραφή σε διαμοιρασμένη μνήμη και αποστολή και λήψη μηνυμάτων και ένα μοντέλο μνήμης, το οποίο περιγράφει πως και πότε η προσπέλαση στη μνήμη μπορεί να γίνει ορατή στα διαφορετικά τμήματα ενός παράλληλου υπολογιστή. Το μοντέλο κόστους συσχετίζει ένα κόστος (το οποίο συνήθως περιγράφει το χρόνο παράλληλου υπολογισμού και την κατανάλωση πόρων) με κάθε βασική λειτουργία. Ένα μοντέλο παράλληλου προγραμματισμού συχνά συσχετίζεται με μία ή περισσότερες γλώσσες προγραμματισμού ή βιβλιοθήκες που υλοποιούν το μοντέλο.

Η ανασκόπηση της βιβλιογραφίας έδειξε ότι έχουν υλοποιηθεί δύο βασικές εκδόσεις στην παράλληλη εκτέλεση προγραμμάτων: Fork-Join Style (που επιτυγχάνει και Nested Parallelism) και SPMD style (Single program, multiple data).

Τα βασικά μοντέλα παράλληλου προγραμματισμού, για τα οποία υπάρχουν διαθέσιμες υλοποιήσεις ελεύθερου λογισμικού, είναι τα ακόλουθα: Parallel Random Access Machine, Unrestricted Message Passing, Asynchronous Shared Memory and Partitioned Global Address Space, Data Parallel Models, Task Parallel Models and Task Graphs.

Τέλος έχει αναπτυχθεί και υλοποιηθεί, μια πληθώρα από γλώσσες προγραμματισμού, για αρχιτεκτονικές παράλληλης επεξεργασίας, όπως η C\*, Occam, PVM, HPF, Linda, αλλά και πολλές ερευνητικές προτάσεις όπως Orca, PCN, CC++, P3L, BSP language. Μεταξύ των γλωσσών ελεύθερου λογισμικού, είναι η OpenCL, η οποία έχει καθιερωθεί σαν το Open Standard για παράλληλο υπολογισμό σε ετερογενή συστήματα. Επίσης η OpenCL μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μια μεγάλη ποικιλία από πολύ-πύρνα συστήματα και έχει τη δυνατότητα κλιμάκωσης (scaling). Μια νέα γλώσσα παράλληλου προγραμματισμού είναι η ParaSail, που μοιάζει με μια τροποποίηση της Java ή της C#. Η διαφορά είναι ότι διαμερίζει αυτόματα ένα πρόγραμμα σε χιλιάδες άλλες εργασίες, οι οποίες μπορούν τότε να διαχυθούν σε διάφορους πυρήνες, ένα τέχνασμα που λέγεται *pico-threading*, το οποίο μεγιστοποιεί τον αριθμό των εργασιών που μπορούν να εκτελεστούν παράλληλα, ανεξάρτητα από τον αριθμό των πυρήνων. Η ParaSail κάνει επίσης αυτόματη αποσφαλμάτωση (debugging), που κάνει τον κώδικα πιο ασφαλής. Παρόλα αυτά είναι σχετικά νέα έκδοση και στην ανασκόπηση εντοπίστηκε ότι έχει ακόμη κάποια bugs.

Συνοψίζοντας, το μέλλον του υπολογισμού σε παράλληλα περιβάλλοντα υπογορεύεται από τις φυσικές και τεχνικές ανάγκες. Οι παράλληλοι υπολογιστές γίνονται περισσότερο υβριδικοί, συνδυάζοντας πολυνηματικό υλικό, πολλαπλούς πυρήνες, μονάδες SIMD, επιταχυντές και on-chip συστήματα επικοινωνίας.

Η τελική επιλογή του μοντέλου θα γίνει σε συνδυασμό με την πολυπλοκότητα των λύσεων του προβλήματος πολλαπλών πεδίων, αλλά και τη μεταφερσιμότητα σε περιβάλλοντα Clusters, GRIDS και Cloud Computing.

## 2.2 Ανασκόπηση Αρχιτεκτονικών Clusters

Ο συνδυασμός ιδεών από τα παράλληλα συστήματα, όπως η ομαδοποίηση πόρων υλικού (συχνά γενικού σκοπού), με έννοιες από τα κατανεμημένα συστήματα, όπως το αφαιρετικό μοντέλο περάσματος μηνυμάτων και η χρήση των υπολογιστικών δυνατοτήτων χαμηλού κόστους που προσφέρει η βιομηχανία των προσωπικών υπολογιστών και των δικτύων, οδήγησαν στην ανάπτυξη των clusters. Οι εμπορικές συστάδες σταθμών εργασίας και τα συστήματα της τάξης Beowulf αποτελούν σήμερα μια ταχύτατα αναπτυσσόμενη κατηγορία υπολογιστικών συστημάτων υψηλής επίδοσης.

Μία εμπορική συστάδα (commodity cluster) είναι ένα τοπικό υπολογιστικό σύστημα που αποτελείται από μία ομάδα ανεξάρτητων υπολογιστών και ένα δίκτυο που τους διασυνδέει. Μια συστάδα είναι τοπική, με την έννοια ότι όλα τα επί μέρους συστήματα που την αποτελούν επιτηρούνται εντός μιας διαχειριστικής περιοχής. Οι υπολογιστικοί αυτοί κόμβοι είναι εμπορικοί και άμεσα διαθέσιμοι (commercial off the shelf – COTS), και είναι ικανοί να λειτουργούν ανεξάρτητα και αυτόνομα για συνήθεις λειτουργίες. Ο κάθε κόμβος μπορεί να αποτελείται

είτε από έναν μικροεπεξεργαστή είτε από πολλούς σε μία συμμετρική πολυεπεξεργαστική σύνθεση (symmetric multiprocessor - SMP). Το διασυνδεδετικό δίκτυο χρησιμοποιεί εμπορικές και άμεσα διαθέσιμες τεχνολογίες δικτύων, τοπικών (local area network - LAN) ή περιοχές συστήματος (systems area network - SAN), οι οποίες απαρτίζουν πολλές ανεξάρτητες δικτυακές δομές ή μία ιεραρχία τέτοιων. Το δίκτυο του cluster ενοποιεί τους υπολογιστικούς του κόμβους και είναι διαχωρισμένο από το εξωτερικό του περιβάλλον.

Ένα cluster μπορεί να είναι ρυθμισμένο έτσι ώστε να εξυπηρετεί διάφορους σκοπούς, όπως υψηλή υπολογιστική επίδοση για την επίλυση ενός προβλήματος, υψηλή χωρητικότητα, διαμεταγωγή για ένα φορτίο διεργασιών, υψηλή διαθεσιμότητα (μέσω πλεονασμού κόμβων) ή υψηλό εύρος ζώνης (μέσω μεγάλου αριθμού δίσκων και καναλιών εισόδου/ εξόδου). Ένα σύστημα της τάξης Beowulf (Beowulf class system) είναι μία συστάδα με κόμβους οι οποίοι είναι προσωπικοί υπολογιστές ή μικροί συμμετρικοί πολυεπεξεργαστικοί προσωπικοί υπολογιστές, ενοποιημένοι με εμπορικά και άμεσα διαθέσιμα δίκτυα και διαθέτουν ένα λειτουργικό σύστημα ανά κόμβο, συνήθως ανοικτού κώδικα και τύπου Unix.

Στην πλειοψηφία των συστημάτων τέτοιου τύπου υπάρχει ένας κόμβος υπεύθυνος για την επαφή με τον υπόλοιπο κόσμο (front end node) μέσω του οποίου πραγματοποιείται και η πρόσβαση στους υπόλοιπους υπολογιστές. Μία πλειάδα (constellation) διαφέρει από μία εμπορική συστάδα στο γεγονός ότι ο αριθμός των επεξεργαστών στους συμμετρικούς πολυεπεξεργαστές των κόμβων υπερβαίνει τον αριθμό των συμμετρικών πολυεπεξεργαστών που αποτελούν το σύστημα, καθώς και στο γεγονός ότι το διασυνδεδετικό τους δίκτυο είναι πιθανά ειδικής τεχνολογίας και σχεδιασμού. Όταν οι διασυνδεδεμένοι υπολογιστές είναι σταθμοί εργασίας, τότε μιλάμε για Δίκτυο Σταθμών Εργασίας (Network Of Workstations - NOW). Τέλος, αναφερόμενοι στην χρήση υπολογιστικών πόρων διαθέσιμων μέσω του διαδικτύου μιλάμε για πλέγματα (grids) υπολογιστών

### Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα των clusters

Λαμβάνοντας υπ' όψιν τις παραδοσιακές προσεγγίσεις από τους χώρους της παράλληλης επεξεργασίας και των παράλληλων αρχιτεκτονικών μπορούμε να εντοπίσουμε αρκετά μειονεκτήματα των clusters [2]. Από την εμπειρία μας, έχουμε διαπιστώσει πόσο κρίσιμοι παράγοντες είναι η καθυστέρηση και το εύρος ζώνης του διασυνδεδετικού δικτύου, πόσο χρήσιμη είναι η κοινόχρηστη μνήμη και πόσο αναγκαίο το ελαφρύ λογισμικό ελέγχου. Σε αυτά τα σημεία, τα clusters υστερούν συγκριτικά με τα συμβατικά παράλληλα συστήματα, όπου το διασυνδεδετικό δίκτυο είναι υψηλότερων επιδόσεων, η κοινή μνήμη, ο καθολικός συγχρονισμός και η διατήρηση της συνοχής της κρυφής μνήμης υλοποιούνται με υλικό, υπερτερώντας σε σχέση με την αντίστοιχη υλοποίηση με λογισμικό, ενώ τέλος το ειδικού τύπου λογισμικό που μπορεί να ελέγχει κάθε κόμβο καταναλώνει λιγότερη μνήμη και αντιδρά πιο γρήγορα από το πλήρες και αυτόνομο

λειτουργικό σύστημα που ελέγχει κάθε κόμβο του cluster. Λόγω των παραπάνω μειονεκτημάτων, τα clusters αποδεικνύονται ακατάλληλα για ορισμένες εφαρμογές. Σε πολλές ωστόσο περιπτώσεις, χρησιμοποιώντας νέες αλγοριθμικές τεχνικές που δεν εξαρτώνται τόσο από την γρήγορη επικοινωνία των κόμβων, τα clusters μπορούν να ανταγωνιστούν σε επιδόσεις παράλληλα συστήματα πολύ υψηλότερου κόστους. Το σημαντικότερο πλεονέκτημα των clusters είναι ότι χρησιμοποιούνται τεχνολογίες υλικού και λογισμικού ευρείας χρήσης. Τόσο τα δίκτυα σταθμών εργασίας, όσο και οι συστάδες προσωπικών υπολογιστών της τάξης Beowulf άνθισαν διότι δεν απαιτούσαν δαπανηρά και μακροπρόθεσμα σχέδια μέχρι να αρχίσουν να αποδίδουν. Το χαρακτηριστικό αυτό οδηγεί προφανώς και σε ένα σαφές πλεονέκτημα κόστους. Συνεπώς ο λόγος κόστους προς απόδοση των clusters μπορεί να υπερτερεί του αντίστοιχου των παραδοσιακών υπερυπολογιστών για εφαρμογές που δεν απαιτούν επικοινωνία υψηλού εύρους ζώνης και χαμηλής καθυστέρησης.

Ένα άλλο σημείο υπεροχής των εμπορικών συστάδων υπολογιστών σε σχέση με τις κλασικές παράλληλες μηχανές, είναι η ευελιξία και η παραμετροποιησιμότητά τους. Ο αριθμός των κόμβων, η χωρητικότητα μνήμης ανά κόμβο, ο αριθμός των επεξεργαστών ανά κόμβο και η τοπολογία του διασυνδεδεμένου δικτύου είναι δομικές παράμετροι που μπορούν να καθοριστούν με μεγάλη λεπτομέρεια και για κάθε cluster ξεχωριστά. Επιπλέον, η δομή του συστήματος μπορεί να αλλάζει ή να επεκτείνεται αξιοποιώντας την ήδη υπάρχουσα υποδομή. Ο εκτεταμένος αυτός έλεγχος στη δομή του συστήματος ωφελεί τόσο τους χρήστες, που μπορούν να έχουν κάθε στιγμή αυτό που επιθυμούν, όσο και τους κατασκευαστές, που μπορούν να καλύπτουν ένα ευρύ φάσμα απαιτήσεων επιδόσεων ή κόστους.

Τέλος, οι εμπορικές συστάδες υπολογιστών μπορούν να ενσωματώνουν γρήγορα τεχνολογικές εξελίξεις που χρησιμοποιούνται μαζικά. Νέοι τύποι επεξεργαστών, μνημών, δίσκων και δικτύων κατασκευάζονται διαρκώς για τους προσωπικούς υπολογιστές, επιτρέποντας και στα clusters να επωφελοούνται από τις προόδους αυτές. Τα clusters επιπλέον επωφελοούνται από πτώσεις τιμών λόγω τις μαζικής παραγωγής των εξαρτημάτων προσωπικών υπολογιστών. Συνολικά θα λέγαμε ότι αν και τα clusters υπολογιστών δεν επιτυγχάνουν πάντα επιδόσεις αντάξιες κορυφαίων παράλληλων μηχανών, το χαμηλό τους κόστος και η ευελιξία που προσφέρουν τα καθιστά σαφώς ανταγωνιστικά.

### Cluster of blades

Ένας blade server [3],[4] είναι ένας απογυμνωμένος server με τμηματική σχεδίαση βελτιστοποιημένος για να ελαχιστοποιήσει τη χρήση φυσικού χώρου και ενέργειας. Ενώ ένας τυπικός rack-mount server μπορεί να λειτουργήσει τουλάχιστον με ένα καλώδιο ρεύματος και ένα καλώδιο ισχύος, στους blade servers έχουν αφαιρεθεί πολλά συστατικά για να εξοικονομήσουν χώρο, να ελαχιστοποιήσουν την κατανάλωση ισχύος, αλλά εξακολουθούν να έχουν όλα εκείνα τα

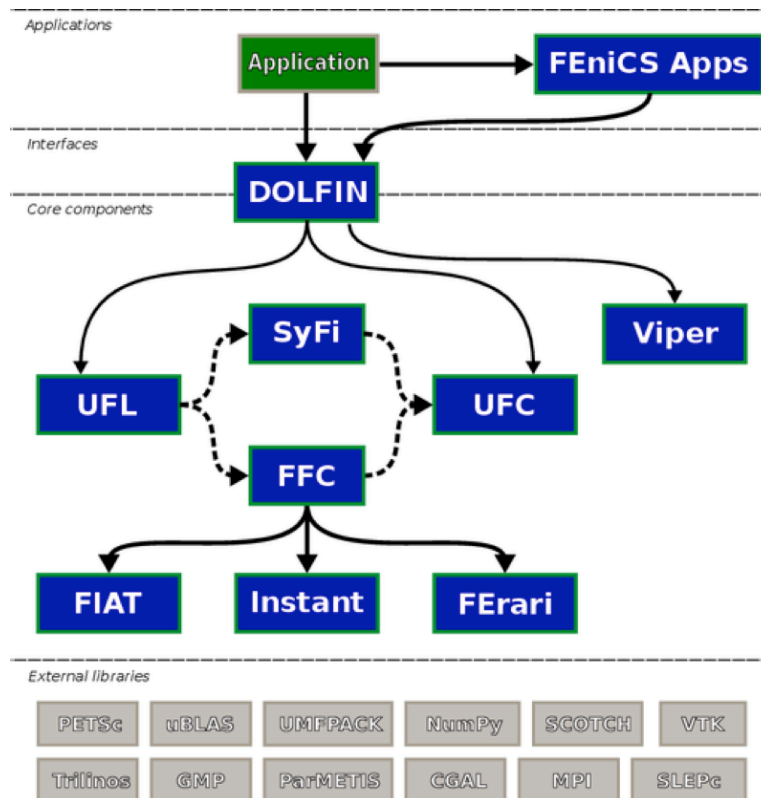
λειτουργικά συστατικά για να θεωρούνται υπολογιστές. Ένα blade enclosure που μπορεί να στηρίζει πολλαπλούς blade servers παρέχει υπηρεσίες, όπως ρεύμα, ψύξη, δικτύωση και διαχείριση.

## 2.3 Δοκιμαστική εγκατάσταση και λειτουργία πλατφόρμας FEniCS

Το project FEniCS [5] είναι μια συλλογή από δωρεάν, ανοιχτού κώδικα, στοιχεία λογισμικού με κοινό στόχο να καταστεί δυνατή αυτοματοποιημένη επίλυση των διαφορικών εξισώσεων. Τα στοιχεία που το απαρτίζουν παρέχουν εργαλεία επιστημονικού υπολογισμού για εργασία με υπολογιστικά πλέγματα, πεπερασμένων στοιχείων μεταβολικές διατυπώσεις για διαφορικές εξισώσεις και μερικές διαφορικές εξισώσεις καθώς επίσης για αριθμητική γραμμική άλγεβρα. Η τρέχουσα σταθερή έκδοση του FEniCS Project είναι η 1.1 η οποία και κυκλοφόρησε τον 7 Ιανουαρίου του 2013. Το FEniCS project έχει σχεδιαστεί ως ένα έργο ομπρέλα για μια συλλογή των διαλειτουργικών συστατικών. Τα βασικά στοιχεία είναι :

- **UFL (Unified Form Language)**, μια γλώσσα προγραμματισμού η οποία είναι ειδικά σχεδιασμένη για έναν συγκεκριμένο τομέα προβλημάτων η οποία έχει ενσωματωθεί στην γλώσσα προγραμματισμού Python και η οποία καθορίζει πεπερασμένα στοιχεία διακριτοποίησης των διαφορικών εξισώσεων σε όρους των πεπερασμένων στοιχείων μεταβλητών τύπων.
- **FIAT (Finite Element Automatic Tabulator)**, μια βιβλιοθήκη Python για την αυτόματη στηλοθέτηση λειτουργιών πεπερασμένων στοιχείων βάσης που εφαρμόζονται σε πολυωνυμικούς χώρους μίας, δύο ή τριών διαστάσεων. Η FIAT παράγει τετραγωνισμένα σημεία τυχαίας σειράς στο πλεγμα αναφοράς και στοιχειοθετεί τις λειτουργίες βάσης και τα αποτελέσματα τους σε οποιοδήποτε δεδομένο ζευγάρι σημείων.
- **FFC (FEniCS Form Compiler)**, ένας μεταγλωττιστής για πεπερασμένων στοιχείων μεταβλητούς τύπους που δέχεται σαν είσοδο κώδικα σε UFL και παράγει UFC έξοδο.
- **UFC (Unified Form-assembly Code)**, μια διεπαφή C++ η οποία και αποτελείται από χαμηλού επιπέδου λειτουργίες για την αξιολόγηση και την δημιουργία πεπερασμένων στοιχείων μεταβλητών τύπων.
- **Instant**, ένα στοιχείο της Python για να ενσωματώνεται C και C++ κώδικας στην γλώσσα προγραμματισμού Python.
- **DOLFIN**, μια C++/Python βιβλιοθήκη η οποία παρέχει δομές δεδομένων και αλγορίθμους για πεπερασμένων στοιχείων πλέγματα, αυτόματη δημιουργία πεπερασμένων στοιχείων και αριθμητική γραμμική άλγεβρα.

Η DOLFIN λειτουργεί ως το κύριο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων και διεπαφή χρήστη. Η λειτουργία της ενσωματώνει τα άλλα συστατικά του FEniCS και διαχειρίζεται την επικοινωνία με τις εξωτερικές βιβλιοθήκες όπως η PETSc, Trilinos, MTL4, και uBLAS για αριθμητική γραμμική άλγεβρα, ParMETIS και SCOTCH για τον διαμερισμό πλεγμάτων και MPI και OpenMP για καταναμημένα συστήματα πληροφορικής.



### Αυτόματη εγκατάσταση με την χρήση του Dorsal

Το DORSAL είναι ένα απλό πρόγραμμα το οποίο αυτοματοποιεί την διαδικασία της ανάκτησης, μεταγλώττισης και εγκατάστασης των πολλών υπο-εργών του FEniCS και τις αλληλεπιδράσεις τους σε UNIX λειτουργικά συστήματα. Οι ακόλουθες πλατφόρμες υποστηρίζονται από το Dorsal:

- Debian GNU/Linux 6.0, Unstable
- Fedora 13, 14, 15
- Gentoo Linux
- Mac OS X 10.6, 10.7 (with MacPorts)

- openSUSE 11.3, 11.4
- Red Hat Enterprise Linux 6
- Ubuntu 10.04 LTS, 10.10, 11.04, 11.10

Για να γίνει η εγκατάσταση του FEniCS με την χρήση του DORSAL απλώς πρέπει να ακολουθηθούν τα εξής βήματα:

1. Να προμηθευτούμε με την πιο πρόσφατη έκδοση του DORSAL από την ακόλουθη σελίδα download page.
2. Αποσυμπίεση του αρχείου σε μια αξιόπιστη τοποθεσία.
3. Προσπέλαση του φακέλου αυτού και τροποποίηση του dorsal.cfg.
4. Ξεκινήστε την διαδικασία για την δημιουργία με την ακόλουθη εντολή: `./dorsal.sh`
5. Σε αυτό το σημείο το DORSAL αναγνωρίζει το λειτουργικό σύστημα και παρέχει μια λίστα από εντολές για να επιβεβαιώσουμε πως το σύστημα είναι έτοιμο για να γίνει εγκατάσταση το FEniCS
6. Όταν έχουν ολοκληρωθεί αυτά τα βήματα τότε μπορεί να ξεκινήσει η εγκατάσταση.

Με το που ξεκινήσει η διαδικασία τότε θα εμφανίζονται σε διάφορα σημεία κείμενα σχετικά με την μεταγλώττιση τα οποία και θα πρέπει να ακολουθήσουμε για να έχουμε μια σωστή εγκατάσταση του FEniCS.

### 3 Παραδοτέα

Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση του Προγράμματος που αφορά τη Δράση 3.1 για το έτος 2012.

### 4 Συνεργασίες

Η τρέχουσα δραστηριότητα απασχόλησε όλα τα μέλη και τους συνεργάτες της ΚΕΟ 3.



## 5 Μελλοντικές Δράσεις

Επεξεργασία μαθηματικών μεθόδων, και ιδιαίτερως μεθόδων Επαναληπτικής Χαλάρωσης στις Διεπαφές, για απεικόνιση και υπολογισμό σε παράλληλες αρχιτεκτονικές.

### Αναφορές

- [1] C. Kessler and J. Keller, *Models for Parallel Computing: Review and Perspectives*, PARS – Mitteilungen 24:Dec.2007, ISSN 0177-0454, GI/ITG PARS.
- [2] M. Baker, A. Apon, R. Bayya and H. Jin, " Cluster Computing and Applications", 2000, <http://www.buyya.com/papers/encyclopedia.pdf>.
- [3] <http://searchdatacenter.techtarget.com/definition/server-blade>.
- [4] <http://searchitchannel.techtarget.com/feature/Using-blade-servers-for-virtualization-clustering>.
- [5] <http://http://fenicsproject.org>.

## Παράρτημα ΣΤ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multiphysics, multidomain) σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές: Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 3.2

#### ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES)



## Πίνακας Περιεχομένων

|                                                                                |           |
|--------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1. ΣΚΟΠΟΣ</b> .....                                                         | <b>3</b>  |
| <b>2. ΕΙΣΑΓΩΓΗ</b> .....                                                       | <b>3</b>  |
| 2.1. ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΕΠΕΞΕΡΓΑΣΙΑΣ ΓΡΑΦΙΚΩΝ (GRAPHICS PROCESSOR UNIT, GPU) .....     | 4         |
| 2.2. ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ ΕΠΑΝΑΔΙΑΤΑΣΣΟΜΕΝΗΣ ΛΟΓΙΚΗΣ (RECONFIGURABLE LOGIC, FPGAs) ..... | 6         |
| 2.3. ΕΤΕΡΟΓΕΝΗ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (HETEROGENEOUS SYSTEMS) .....                         | 7         |
| <b>3. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ</b> .....                                                    | <b>8</b>  |
| 3.1. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ ΣΕ GPU (CUDA, OPENCL) .....                     | 8         |
| 3.2. ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΙΣΜΟΣ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ ΣΕ FPGAs .....                                  | 9         |
| <b>4. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ</b> .....                                                   | <b>12</b> |



**Ευρωπαϊκή Ένωση**  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



**ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ**  
**ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ**

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



**ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ**

## 1. Σκοπός

Ο σκοπός της Δράσης 3.2 είναι η αποδοτική υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων για ασυνεχή προβλήματα πολλαπλών πεδίων σε αρχιτεκτονικές επεξεργασίας γραφικών (Graphics Processor Units, GPU) καθώς και σε επαναδιατασσόμενες (reconfigurable) αρχιτεκτονικές (πχ. Field Programmable Gate Arrays, FPGAs).

Στόχος της μελέτης θα είναι να εκτιμηθεί η καταλληλότητα του κάθε πακέτου λογισμικού (συνολικά ή κατά τμήματά του) για εκτέλεση σε καθεμιά από τις πολυπύρηνες πλατφόρμες που θα επιλεγούν ως πειραματικές πλατφόρμες στο έργο, ή εναλλακτικά για επιτάχυνση με χρήση εξειδικευμένου κατά περίπτωση αναδιατασσόμενου υλικού.

Με βάση τα αποτελέσματα της μελέτης θα μεταφερθούν και απεικονιστούν τα πακέτα λογισμικού – είτε καθολικά, είτε κατά τμήματα - στα κατάλληλα κατά περίπτωση πολυπύρηντα συστήματα. Επίσης θα κατασκευαστεί εξειδικευμένο υλικό για την επιτάχυνση συγκεκριμένων υπολογιστικών πυρήνων των εφαρμογών και το απαραίτητο λογισμικό για την επικοινωνία με τον υπολογιστή ξενιστή (Host computer).

Συγκεκριμένα για την υλοποίηση σε FPGA, ενδέχεται να χρησιμοποιηθεί λογισμικό CAD που θα αναπτυχθεί στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας. Το λογισμικό αυτό μετατρέπει εφαρμογές που έχουν αναπτυχθεί σε OpenCL σε επιταχυντές υλικού (hardware accelerators). Με αυτόν τον τρόπο επιταχύνει κατά πολύ την ανάπτυξη ενός συστήματος FPGA χωρίς να χρειάζονται γνώσεις της αρχιτεκτονικής του συστήματος.

Ως ενδεικτικές πολυπύρηνες πλατφόρμες προτείνονται οι επεξεργαστές γενικού σκοπού της Intel ή της AMD καθώς και GPUs της NVIDIA ή της ATI. Ως ενδεικτική πλατφόρμα αναδιατασσόμενης λογικής προτείνονται συστήματα τα οποία περιλαμβάνουν Xilinx FPGA και μικροεπεξεργαστή σε κάρτα PCI-Express και μπορούν να τοποθετηθούν σε σύστημα αρχιτεκτονικής x86 ή συμβατό.

Σημειώνουμε ότι για τις ανάγκες της προτεινόμενης έρευνας είναι επιβεβλημένη η προμήθεια υπολογιστικών συστημάτων FPGA/GPU αρχιτεκτονικής.

## 2. Εισαγωγή

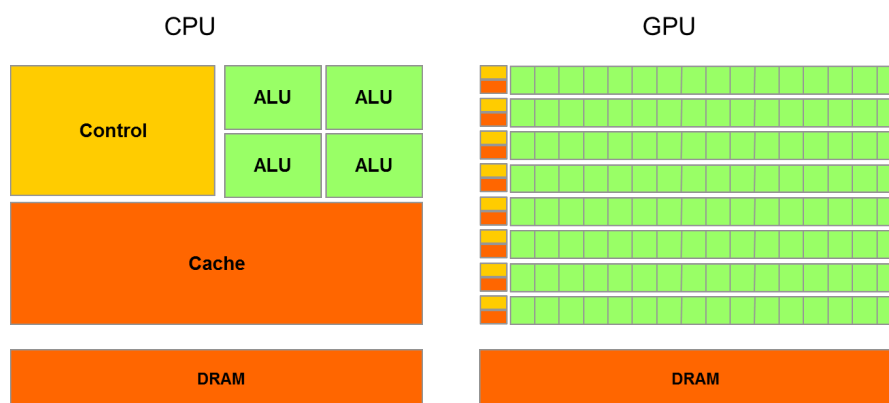
Σε αυτό το κεφάλαιο θα κάνουμε μία ανασκόπηση των βασικών επεξεργαστικών μονάδων που θα χρησιμοποιηθούν στην Δράση 3.2 του MATENVMED.



## 2.1. Τεχνολογία Επεξεργασίας Γραφικών (Graphics Processor Unit, GPU)

Η GPU είναι ένας σύγχρονος πολυεπεξεργαστής (multicore) με υψηλό βαθμό παραλληλίας [4]. Μία σύγχρονη GPU διαθέτει μία ενοποιημένη αρχιτεκτονική για γραφικά και υπολογιστική που χρησιμοποιείται και ως προγραμματιζόμενος επεξεργαστής. Οι αρχιτεκτονικές GPU βασίζονται σε παράλληλες διατάξεις πολλών και σχετικά απλών προγραμματιζόμενων επεξεργαστών (Streaming Processors, SPs).

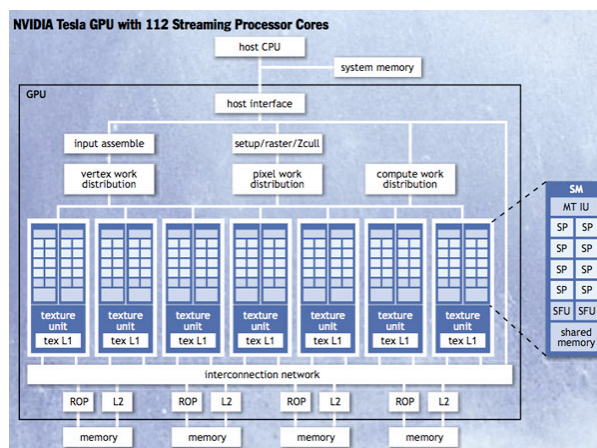
Σε σύγκριση με τις πολυπύρηνες CPUs (multicore CPUs), οι GPUs έχουν πολύ μεγαλύτερο αριθμό πυρήνων (cores) με διαφορετικό στυλ αρχιτεκτονικής που εστιάζει στην αποδοτική εκτέλεση πολλών νημάτων (threads). Με την χρήση πολλών απλούστερων πυρήνων και με την βελτιστοποίηση της συμπεριφοράς της παραλληλίας δεδομένων μεταξύ ομάδων νημάτων, μεγαλύτερο μέρος των τρανζίστορ του κάθε chip είναι αφιερωμένο σε υπολογισμούς, και μικρότερο σε μνήμες και σε υλικό ελέγχου



Εικόνα 1. Βασικές αρχές της αρχιτεκτονικής της CPU και της GPU

(Control) όπως φαίνεται στην Εικόνα 1.

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 2, μία σύγχρονη GPU περιέχει πολλούς πυρήνες επεξεργαστών. Ο επεξεργαστής της Εικόνα 2 αποτελείται από 112 επεξεργαστές συνεχούς ροής (Streaming Processors, SPs) οι οποίοι είναι οργανωμένοι ως 14 πολυνηματικοί πολυεπεξεργαστές συνεχούς ροής (Streaming Multiprocessors, SMs). Κάθε SP εκτελεί σε κάθε χρονική στιγμή και ένα νήμα (thread) της γλώσσας CUDA που θα περιγραφεί στο επόμενο κεφάλαιο. Κάθε SM έχει οκτώ πυρήνες SP, δύο μονάδες ειδικών μαθηματικών συναρτήσεων (Special Function Units, SFUs), κρυφές μνήμες cache εντολών και σταθερών, μία Multithreaded Μονάδα εντολών και μία κοινόχρηστη μνήμη η οποία μπορεί να προσπελασθεί από όλα τα SPs που ανήκουν στο δεδομένο SM.



Εικόνα 2. Βασική αρχιτεκτονική της NVIDIA Tesla GPU.

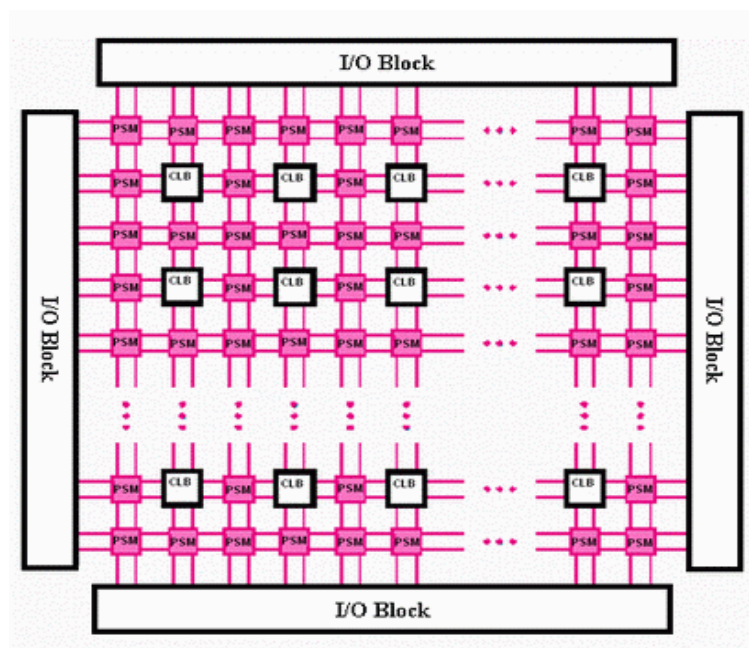
Αυτή είναι η βασική αρχιτεκτονική Tesla που υλοποιείται στην GeForce 8800 GPU της NVIDIA. Στην ενδοποιημένη αυτή αρχιτεκτονική εκτελούνται τα παραδοσιακά προγράμματα γραφικών για σκίαση κορυφών, γεωμετρικών σχημάτων και pixels καθώς και προγράμματα γενικότερης υπολογιστικής μέσω της γλώσσας προγραμματισμού CUDA αλλά και της OpenCL.

Η Εικόνα 2 δείχνει 7 ομάδες από SMs όπου δύο SMs μοιράζονται μία μονάδα επεξεργασίας υψής (texture unit) και μία μνήμη L1 cache για δεδομένα (data). Το texture unit παραδίδει φιλτραρισμένα αποτελέσματα στον SM με δεδομένο ένα σύνολο συντεταγμένων ενός χάρτη υψής (texture map). Η μνήμη L1 cache χρησιμεύει για να μειώσει τον αριθμό των προσπελάσεων από τα SPs στην κύρια μνήμη (DRAM). Ο αριθμός των επεξεργαστών και ο αριθμός των μνημών μπορούν να προσαρμοστούν ώστε να σχεδιάζονται συστήματα GPU για διαφορετική απόδοση και διαφορετικό κόστος.

Ένα βασικό χαρακτηριστικό της αρχιτεκτονικής GPU είναι ότι όλα τα SPs ενός SM εκτελούν την ίδια εντολή κάθε χρονική στιγμή, πιθανώς με διαφορετικά δεδομένα. Υλοποιεί δηλ. η GPU ένα σύστημα Single Instruction Multiple Data (SIMD). Αυτός ο περιορισμός βοηθάει στην μείωση του instruction bandwidth και ουσιαστικά κάνει δυνατή την ταυτόχρονη εκτέλεση μεγάλου αριθμού νημάτων (threads) σε κάθε κύκλο μηχανής.

## 2.2. Τεχνολογία Επαναδιατασσόμενης Λογικής (Reconfigurable Logic, FPGAs)

Τα ολοκληρωμένα κυκλώματα επαναδιατασσόμενης λογικής (reconfigurable logic) στα οποία ανήκουν και οι FPGAs (Field Programmable Logic Arrays), περιλαμβάνουν συστοιχίες από υπολογιστικά κυκλώματα (CLBs) η λειτουργικότητα των οποίων μπορεί να μεταβληθεί πολλές φορές κατά τον χρόνο ζωής τους [1]. Ουσιαστικά αυτά τα υπολογιστικά κυκλώματα είναι Lookup Tables (LUTs) με  $N$  εισόδους (συνήθως το  $N$  είναι μεταξύ 4 και 6) και τα οποία μπορούν να υλοποιήσουν οποιαδήποτε συνδυαστική boolean συνάρτηση με  $N$  εισόδους. Αυτά τα υπολογιστικά κυκλώματα προγραμματίζονται μέσω configuration bits και συνδέονται μεταξύ τους μέσω πόρων διασύνδεσης (interconnects) που επίσης μπορούν να προγραμματιστούν μέσω configuration bits (Εικόνα 3). Με αυτόν τον τρόπο οποιοσδήποτε αλγόριθμος μπορεί να απεικονισθεί στις συστοιχίες λογικών κυκλωμάτων με το να υπολογίσουμε πρώτα την λογική boolean συνάρτηση του αλγορίθμου, να την απεικονίσουμε στο λογικό κύκλωμα και μετά να διασυνδέσουμε τα λογικά κυκλώματα μεταξύ τους.



Εικόνα 3. Η αρχιτεκτονική της FPGA.

Αν και η βασική αρχιτεκτονική της Εικόνα 3 παραμένει σχεδόν αναλλοίωτη σε διαδοχικές γενιές κυκλωμάτων επαναδιατασσόμενης λογικής,

οι σύγχρονες FPGA περιλαμβάνουν επιπλέον διατάξεις που έχουν πολύ πιο συγκεκριμένη λειτουργικότητα. Τέτοιες διατάξεις είναι οι εξής:

- Εσωτερικές μνήμες SRAM. Κάθε FPGA περιέχει έναν μεγάλο αριθμό από μνήμες οι οποίες μπορούν να προσπελασθούν σε έναν κύκλο μηχανής. Οι μνήμες προσφέρουν πολύ μεγάλο bandwidth στην εφαρμογή γιατί γλυτώνουν το σύστημα από χρονοβόρες και κοστοβόρες προσπελάσεις σε εξωτερικές μνήμες DRAM.
- Μονάδες για Digital Signal Processing (DSP). Οι μονάδες αυτές αποτελούνται από κυκλώματα πολλαπλασιαστών και προσθετών (multiply-add) που είναι αφιερωμένα στο να επιτελούν πολύ γρήγορες πράξεις σε εφαρμογές όπως DSP filtering.
- Ολόκληροι επεξεργαστές και περιφερειακά. Οι σύγχρονες FPGAs έχουν φτάσει σε τέτοιο βαθμό ολοκλήρωσης ώστε είναι δυνατόν να περιέχουν ολόκληρα συστήματα όπως επεξεργαστές ARM και ακόμα και GPUs. Για παράδειγμα, η Zynq FPGA από την Xilinx και την ARM συνδυάζει σε ένα τσιπ έναν διπύρρηνο επεξεργαστή ARM Cortex-A9 με τα παραδοσιακά υπολογιστικά κυκλώματα (CLBs) [2]. Αυτή η FPGA μπορεί να τρέξει οποιοδήποτε λειτουργικό σύστημα το οποίο έχει τρέξει στον ARM (πχ Linux) και χρησιμοποιεί τα CLBs κυρίως για την δημιουργία επιταχυντών υλικού (hardware accelerators).

### 2.3. Ετερογενή Συστήματα (Heterogeneous Systems)

Στην σύγχρονη υπολογιστική, ο όρος Ετερογενή Συστήματα (Heterogeneous Systems) αναφέρεται σε υπολογιστικές πλατφόρμες οι οποίες αποτελούνται από ανόμοιους επεξεργαστές. Για παράδειγμα μπορεί να αποτελούνται από συμβατικές πολυπύρηνες CPUs, από GPUs και τώρα τελευταία ακόμα και από FPGAs. Η χρήση διαφορετικών αρχιτεκτονικών σε μία ετερογενή πλατφόρμα έχει επεκταθεί τα τελευταία χρόνια κυρίως λόγω της ανάγκης για αύξηση της ταχύτητας αλλά και της ενεργειακής απόδοσης ενός τέτοιου συστήματος.

Με το να χρησιμοποιούμε ακριβώς τον επεξεργαστή που χρειαζόμαστε για να επιλύσουμε ένα πρόβλημα μπορούμε να επιτύχουμε μείωση της κατανάλωσης ισχύος και ενέργειας στο ποσό που απαιτείται ακριβώς για να επιλυθεί το πρόβλημα. Από την άλλη μεριά όμως, η χρήση διαφορετικών αρχιτεκτονικών δυσκολεύει την ανάπτυξη λογισμικού για ένα τέτοιο σύστημα, μιας και η μηχανικοί λογισμικού θα πρέπει να αναπτύσσουν εφαρμογές χρησιμοποιώντας διαφορετικά εργαλεία για κάθε επεξεργαστή.

Για να επιλυθεί το πρόβλημα του προγραμματισμού εφαρμογών σε ετερογενή συστήματα, η βιομηχανία υπολογιστών δημιούργησε προγραμματιστικά μοντέλα τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον προγραμματισμό διαφορετικών αρχιτεκτονικών. Για παράδειγμα, η OpenCL επεκτείνει την γλώσσα C και ορίζει ένα Application Programming Interface (API) το οποίο επιτρέπει σε προγράμματα να τρέχουν σε έναν Host επεξεργαστή (στην CPU) και να δημιουργούν παράλληλους πυρήνες (kernels). Αυτοί οι πυρήνες μπορούν να στέλνονται για εκτέλεση είτε σε μία

συμβατική CPU, είτε σε GPUs είτε ακόμα και σε FPGAs. Τα προγράμματα σε OpenCL μπορούν να μεταγλωττιστούν κατά την διάρκεια της εκτέλεσης του προγράμματος (run-time compilation) γεγονός που κάνει τις εφαρμογές σε OpenCL φορητές (portable) για διαφορετικές αρχιτεκτονικές.

### 3. Μεθοδολογία

#### 3.1. Προγραμματισμός εφαρμογών σε GPU (CUDA, OpenCL)

Το μοντέλο προγραμματισμού της CUDA (ή OpenCL) επεκτείνει τις γλώσσες προγραμματισμού C και C++ ώστε να εκμεταλλεύονται τους υψηλότερους βαθμούς παραλληλίας που υπάρχουν στις GPUs. Από την αρχική κυκλοφορία της CUDA το 2007, πολλοί προγραμματιστές ανέπτυξαν προγράμματα σε CUDA/OpenCL για μια ευρεία γκάμα εφαρμογών μεταξύ των οποίων multimedia, επεξεργασία σεισμικών δεδομένων, ταξινόμηση, αναζήτηση, υπολογιστική χημεία κ.ο.κ.

Ο προγραμματιστής CUDA γράφει ένα σειριακό πρόγραμμα που καλεί παράλληλους πυρήνες (kernels) οι οποίοι μπορεί να είναι από απλές συναρτήσεις μέχρι πλήρη προγράμματα. Ένας πυρήνας εκτελείται παράλληλα από ένα σύνολο παράλληλων νημάτων (threads) έτσι ώστε κάθε νήμα να εκτελείται σε ένα SP σε κάθε χρονική στιγμή. Ο προγραμματιστής οργανώνει αυτά τα νήματα σε μία ιεραρχία μπλοκ νημάτων και πλέγματα από μπλόκς. Ένα τέτοιο μπλοκ νημάτων (thread block) είναι ένα σύνολο από ταυτόχρονα νήματα που μπορούν να συνεργαστούν μέσω συγχρονισμού barrier και μέσω κοινής πρόσβασης σε ένα χώρο μνήμης ιδιωτικό για το μπλοκ. Ένα πλέγμα (grid) είναι ένα σύνολο από μπλοκ νημάτων που το καθένα (μπλοκ) μπορεί να εκτελείται ανεξάρτητα και για αυτόν τον λόγο μπορούν να εκτελούνται παράλληλα.

Όταν καλεί έναν πυρήνα, ο προγραμματιστής καθορίζει τον αριθμό των νημάτων ανά μπλοκ και τον αριθμό των μπλοκ που αποτελούν το πλέγμα. Κάθε νήμα λαμβάνει έναν μοναδικό αριθμό ταυτότητας νήματος (thread ID) *threadIdx* μέσα στο μπλοκ νημάτων που ανήκει με αρίθμηση 0, 1, 2, ..., *blockDim-1*, και κάθε μπλοκ νημάτων λαμβάνει έναν μοναδικό αριθμό ταυτότητας μπλοκ (block ID) *blockIdx* μέσα στο πλέγμα που ανήκει. Για ευκολία, τα μπλοκ νημάτων μπορούν να έχουν μέχρι και 3 διαστάσεις και προσπελούνται μέσω των πεδίων *.x*, *.y* και *.z*.

Όλα τα παραπάνω μπορούν να φανούν με ένα απλό παράδειγμα στο οποίο θέλουμε να προσθέσουμε δύο πίνακες μίας διάστασης (Εικόνα 4). Οι πίνακες είναι κινητής υποδιαστολής απλής ακρίβειας.



Στο δεξί μέρος της Εικόνα 4 ο κώδικας CUDA είναι ο πυρήνας που εκτελεί κάθε νήμα (thread). Όταν ο προγραμματιστής καλεί τον πυρήνα vadd από τον κώδικα του Host, το σύστημα χρόνου εκτέλεσης (run time system) της CUDA δημιουργεί έναν αριθμό νημάτων και κάθε νήμα εκτελεί την δική του εκδοχή του πυρήνα. Σε κάθε νήμα αντιστοιχεί ένα διαφορετικό idx και κάθε νήμα επεξεργάζεται και διαφορετικό κομμάτι των πινάκων a, b, και c. Η εκτέλεση ενός thread ανατίθεται σε ένα συγκεκριμένο SP στην GPU.

|                                      |                                 |
|--------------------------------------|---------------------------------|
| void add(int* a,                     | <b>__kernel</b> void vadd(      |
| int* b,                              | <b>__global</b> int* a,         |
| int* c) {                            | <b>__global</b> int* b,         |
| for (int idx=0;idx<sizeof(a); idx++) | <b>__global</b> int* c) {       |
| c[idx] = a[idx] + b[idx];            | idx = <b>threadIdx.x</b> +      |
| }                                    | <b>blockDim.x * blockDim.x;</b> |
|                                      | c[idx] = a[idx] + b[idx];       |
|                                      | }                               |

Εικόνα 4. Κώδικας πρόσθεσης δύο διανυσμάτων σε C (αριστερά) και σε CUDA (δεξιά)

## 3.2. Προγραμματισμός εφαρμογών σε FPGAs

### Προγραμματισμός με HDL

Η ανάπτυξη κυκλωμάτων σε FPGAs είναι μια επίπονη και χρονοβόρα διαδικασία επειδή απαιτεί από τον σχεδιαστή γνώσεις λεπτομερείς γνώσεις υλικού (hardware) και αρχιτεκτονικής. Ο σχεδιαστής θα πρέπει να αναλύσει τις προδιαγραφές του προβλήματος που πρέπει να αναλύσει, να χωρίσει το πρόβλημα σε μικρότερα προβλήματα και να υλοποιήσει το κάθε ένα από αυτά με την χρήση γλωσσών περιγραφής υλικού (Hardware Description Languages, HDL) όπως η Verilog και η VHDL. Οι γλώσσες αυτές περιγράφουν την αρχιτεκτονική του συστήματος με αρκετά μεγάλη λεπτομέρεια σε επίπεδο κύκλων ρολογιού και ως εκ τούτου είναι ακατάλληλες για χρήση από προγραμματιστές λογισμικού που προτιμούν να μην εισέρχονται σε τόσο μεγάλες λεπτομέρειες και σε τόσο χαμηλό επίπεδο κοντά στο hardware. Η υλοποίηση ενός αλγορίθμου σε FPGA απαιτεί τόσο αυτόν κάθε αυτό το σχεδιασμό του αλγορίθμου σε κάποια γλώσσα περιγραφής υλικού όσο και καλή γνώση του τρόπου με τον οποίο τα δεδομένα της εφαρμογής προσπελαύνονται.

Η διαδικασία σχεδίασης ενός αλγορίθμου σε υλικό διαφέρει κατά πολύ από την ανάπτυξη εφαρμογών λογισμικού. Κατά την πλειοψηφία θεωρείται πιο δύσκολη και περισσότερο στρυφνή εφόσον δεν συγχωρεί πολλές παραβλέψεις που κάνουν οι προγραμματιστές λογισμικού. Μία πολύ σημαντική διαφορά μεταξύ λογισμικού και υλικού είναι πως το δεύτερο είναι εν γένει παράλληλο. Έτσι για να γίνει ακόμα καλύτερη εκμετάλλευση των

δυνατοτήτων ενός προσαρμοσμένου hardware accelerator χρειάζεται η υλοποίηση να χαρακτηρίζεται από παραλληλία πράξεων.

Η σημασία της γνώσης σχετικά με τον τρόπο με τον οποίο τα δεδομένα μιας εφαρμογής προσπελαύνονται γίνεται εμφανής αν σκεφτεί κανείς πως η μεταφορά και διαχείριση τμημάτων μνήμης παίζει πολύ μεγάλο ρόλο στην απόδοση ενός αλγορίθμου. Στην περίπτωση των hardware accelerators υπό την μορφή FPGA το πρόβλημα γίνεται μεγαλύτερο επειδή η διαθέσιμη μνήμη είναι προδιαγεγραμμένη και σε σύγκριση με ένα τυπικό υπολογιστή κατά πολύ μικρότερη. Έτσι σε περιπτώσεις στις οποίες δεν γίνεται εκμετάλλευση του μοτίβου προσπέλασης δεδομένων, ένας αλγόριθμος μπορεί φαινομενικά να απαιτεί περισσότερη μνήμη από όση είναι διαθέσιμη σε μία δεδομένη FPGA και έτσι να μην είναι δυνατή η σύνθεσή του. Αν όμως αποδειχθεί με μαθηματικό τρόπο πως από η πραγματική απαίτηση μνήμης είναι μικρότερη από τη φαινομενική τότε γίνεται εφικτή η σύνθεση του σε μία FPGA.

Πέρα από το παραπάνω πρακτικό μέρος η γνώση που σχετίζεται με το μοτίβο προσπέλασης μνήμης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για περαιτέρω βελτίωση της απόδοσης ενός αλγορίθμου. Εφόσον αναγνωρισθούν τα στοιχεία ενός πίνακα που διαβάζονται από κάποιο κομμάτι κώδικα υλοποιημένο ως hardware accelerator τότε μπορούμε να μειώσουμε το κόστος μεταφοράς μνήμης από τον επεξεργαστή στον hardware accelerator με το να μεταφέρουμε μόνο τα χρήσιμα στοιχεία της μνήμης που αντιστοιχεί στον δεδομένο πίνακα. Αντίστοιχη διαδικασία χρησιμοποιείται για την μεταφορά των αποτελεσμάτων από τον hardware accelerator πίσω στον επεξεργαστή, με το να αναγνωρίζονται και να μεταφέρονται μόνο κομμάτια μνήμης που αντιστοιχούν σε αποτελέσματα που παρήγαγε ο hardware accelerator κατά την εκτέλεσή του.

### Προγραμματισμός με C/OpenCL – High Level Synthesis tools

Για να γίνουν οι FPGAs ελκυστικές στο επικρατούσα υπολογιστική (mainstream computing) ή και στην υπολογιστική υψηλών επιδόσεων (high performance computing) θα πρέπει να χρησιμοποιήσουν για τον προγραμματισμό τους μοντέλα πλησιέστερα στα μοντέλα ανάπτυξης λογισμικού. Αυτό γίνεται επιτακτική ανάγκη λόγω της δυνατότητας των FPGAs να ενσωματώνονται σε συστήματα που αποτελούνται από CPU και GPUs και να προσφέρουν υψηλότερη απόδοση και ενεργειακή αποδοτικότητα.

Για λόγους αύξησης της αποδοτικότητας των σχεδιαστών αλλά κυρίως λόγω της επιθυμίας να επεκταθεί ο αριθμός των σχεδιαστών FPGA και σε προγραμματιστές λογισμικού, έχει δημιουργηθεί μια μεγάλη ώθηση τα τελευταία χρόνια σε εργαλεία σχεδίασης υψηλού επιπέδου (High Level Synthesis Tools). Τα εργαλεία αυτά δίνουν την ευκαιρία στον χρήστη να εκφράσει το κύκλωμα που θέλει να υλοποιήσει σε μια FPGA σε κάποια γλώσσα προγραμματισμού υψηλού επιπέδου όπως C, C++, OpenCL και να αναλάβουν την μετάφραση του προγράμματος αυτού σε γλώσσα HDL, Verilog

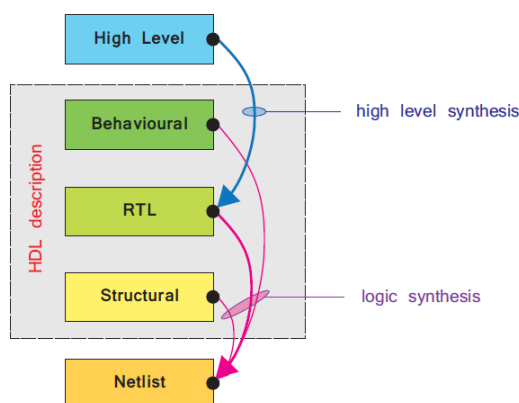


ή VHDL. Εκτός από τον ίδιο τον αλγόριθμο σε κάποια γλώσσα σαν την C, ο σχεδιαστής θα πρέπει να καθορίσει και διάφορους περιορισμούς στο τελικό του κύκλωμα όπως χρόνο απόκρισης (latency), throughput, συχνότητα ρολογιού, αλλά και το μέγεθος του τελικού κυκλώματος σε αριθμό βασικών συστατικών στοιχείων. Αυτοί οι περιορισμοί καθοδηγούν ένα High Level Synthesis Tool στο να δημιουργήσει το κατάλληλο τελικό κύκλωμα σε HDL (Εικόνα 5)

Στην συνέχεια, μια σειρά από εργαλεία CAD μετατρέπουν το HDL κύκλωμα σε λογικές πύλες (gate level netlist) και από εκεί το τοποθετούν στα υπάρχοντα υπολογιστικά κυκλώματα (CLBs) αφού το διασυνδέσουν μέσω των διαύλων διασύνδεσης (interconnects). Το τελικό αποτέλεσμα είναι ένα configuration file το οποίο περιέχει όλα τα configuration bits που διαμορφώνουν την λειτουργικότητα των CLBs και των διασυνδέσεων.

Βασιζόμενοι σε όλες τις προηγούμενες παρατηρήσεις, είναι σκοπός μας να εξετάσουμε την δυνατότητα χρήσης γλωσσών όπως η OpenCL για την απεικόνιση αλγορίθμων σε FPGAs. Πηγαίνοντας ένα βήμα παραπέρα, θα χρησιμοποιήσουμε τον ίδιο κώδικα OpenCL ή C για εκτέλεση σε όλες τις υπολογιστικές πλατφόρμες που θα χρησιμοποιηθούν για το project. Αυτό θα γίνει δυνατόν μέσω λογισμικού CAD που αναπτύσσεται στο Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας και που υλοποιεί τεχνικές High Level Synthesis για την δημιουργία επιταχυντών υλικού από προγράμματα OpenCL [3]. Στα πλαίσια του project, το SOpenCL θα βελτιωθεί ώστε να παράγει βέλτιστο υλικό για τους συγκεκριμένους αλγόριθμους που θα παραχθούν στα πλαίσια του project.

Εκτός του SOpenCL θα δοκιμασθούν και εμπορικά εργαλεία High Level Synthesis όπως το Vivado HLS το οποίο αποτελεί και το στάνταρντ εργαλείο για Xilinx FPGAs. Το Vivado HLS δέχεται σαν είσοδο ένα πρόγραμμα γραμμένο σε C ή C++ καθώς και οδηγίες από τον προγραμματιστή μέσω #pragmas που υποδεικνύουν στο εργαλείο τις βελτιστοποιήσεις στην απόδοση ή στο μέγεθος του παραγόμενου υλικού που θα πρέπει να γίνουν.



Εικόνα 5. High Level Synthesis και Logic Synthesis

## 4. Βιβλιογραφία

- [1] Katherine Compton and Scott Hauck. Reconfigurable computing: a survey of systems and software. *ACM Computing Surveys*. Vol. 34, no. 2. June 2002.
- [2] L.H. Crockett, R.A. Elliot. The Zynq Book: Embedded Processing with the Arm Cortex-A9 on the Xilinx Zynq-7000 All Programmable SoC. 2014. Strathclyde Academic Media. Available at [www.zynqbook.com](http://www.zynqbook.com).
- [3] Muhsen Owaida, Nikolaos Bellas, Christos Antonopoulos, Konstantis Daloukas, Charalambos Antoniadis. Massively Parallel Programing Models Used as Hardware Description Languages: The OpenCL Case. *International Conference on Computer-Aided Design (ICCAD)*, November 6-10, 2011, San Jose, CA
- [4] David A. Patterson and John L. Hennessy, Computer Organization and Design - The Hardware / Software Interface, (Revised 4th Edition). The Morgan Kaufmann Series in Computer Architecture and Design. Academic Press, 2012

## Παράρτημα Ζ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 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      | Υλοποίηση Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ) . . . .                                    | 4        |
| 2.2      | Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων και Σύγχρο-<br>νων Μέσων Αποθήκευσης) . . . . . | 6        |
| 2.2.1    | Χρήση Σύγχρονου Υλικού για την Επίλυση Μεγάλων Αραιών<br>Γραμμικών Συστημάτων . . . . .       | 6        |
| 2.2.2    | Αλγόριθμοι Out-of-Core & Μνήμες Flash . . . . .                                               | 7        |
| <b>3</b> | <b>Συνεργασίες</b>                                                                            | <b>8</b> |
| <b>4</b> | <b>Παραδοτέα</b>                                                                              | <b>9</b> |
| <b>5</b> | <b>Μελλοντικές Δράσεις</b>                                                                    | <b>9</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.

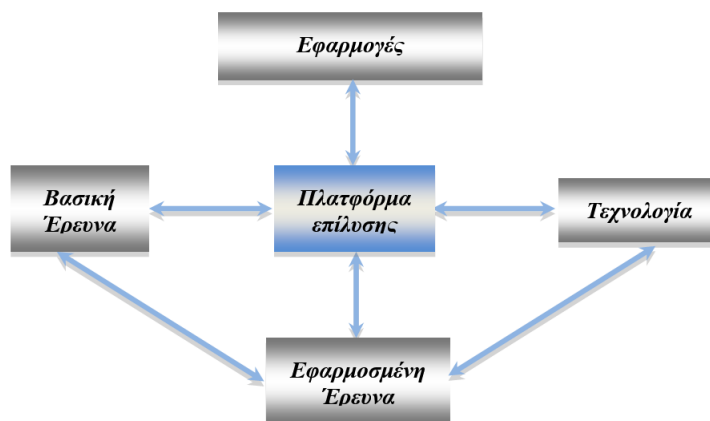
Η παρούσα δράση έχει ως στόχο να σχεδιάσει με σαφήνεια μια αρχιτεκτονική αναφοράς, η οποία φιλοδοξεί να θέσει τις βάσεις για μια ενοποιημένη προσέγγιση αντιμετώπισης των σύνθετων προβλημάτων που απασχολούν το έργο MATENVMED, καλύπτοντας τις παρακάτω αναγκαιότητες.

- 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.

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 1, η πλατφόρμα επίλυσης προβλημάτων αποτελεί κεντρικό σημείο του έργου, καθώς καλείται να ενοποιήσει και να συγκεράσει τις ερευνητικές προσπάθειες που αναπτύσσονται στις υπόλοιπες δράσεις του έργου. Κατά το έτος 2012 βασικός στόχος της παρούσας δράσης ήταν η επισκόπηση της υπάρχουσας κατάστασης σε ότι αφορά τις αρχιτεκτονικές ενδιαφέροντος του έργου, αλλά και ήδη υπάρχουσες πλατφόρμες επίλυσης προβλημάτων.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής: Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε. Στην παράγραφο 4 αναφερόμαστε στα παραδοτέα που παρήχθησαν στα πλαίσια της δράσης. Στην παράγραφο 3 περιγράφουμε τις συνεργασίες που αναπτύχθηκαν, ενώ η παράγραφος 5 ολοκληρώνει την έκθεση με τη συζήτηση των μελλοντικών δραστηριοτήτων στα πλαίσια της δράσης.





Εικόνα 1: Συνολική αρχιτεκτονική MATENVMED

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Υλοποίηση Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ)

Κατά το έτος 2012 πραγματοποιήθηκε επισκόπηση των ήδη υπάρχουσών λύσεων στον τομέα των περιβαλλόντων επίλυσης προβλημάτων για PDEs. Αποφασίστηκε να εξαντληθεί κάθε περιθώριο αξιολόγησης και αξιοποίησης υπαρχόντων περιβαλλόντων επίλυσης προβλημάτων (ΠΕΠ). Με τον τρόπο αυτό, θα είναι 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 μερικών διαφορικών εξισώσεων κατάλληλων για τις απαιτήσεις των κεντρικών προβλημάτων του έργου.
- 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 που θα επιτρέπει γρήγορη ανάπτυξη και εύκολο πειραματισμό.

- Δυνατότητα χρήσης ως ανεξάρτητο τμήμα λογισμικού στα πλαίσια μεγαλύτερων εφαρμογών.

Διαπιστώθηκε η διαθεσιμότητα μεγάλου αριθμού ΠΕΠ, με αρκετά κοινά μεταξύ τους χαρακτηριστικά. Πρόκειται τυπικά για αναπτυξιακές (ενίοτε και ερευνητικές) προσπάθειες μεγάλης κλίμακας. Κατά κανόνα είναι γραμμένα σε C/C++ και τα μη εμπορικά ΠΕΠ είναι ανοιχτού κώδικα. Παρά τον μεγάλο τους αριθμό, δε διαπιστώθηκαν μεγάλες διαφορές στις βασικές τους ιδέες. Πολλά μπορούν να αξιοποιήσουν τον παραλληλισμό στο επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας, αλλά και με χρήση MPI ή PosixThreads. Κάποια πιο σύγχρονα περιβάλλοντα είναι επίσης ικανά να αξιοποιήσουν επιταχυντές με χρήση OpenCL.

Τα σημαντικότερα εμπορικά πακέτα που εξετάστηκαν είναι τα ακόλουθα:

- Matlab PDE Toolbox<sup>1</sup>
- COMSOL<sup>2</sup>
- Abaqus<sup>3</sup>
- FlexPDE<sup>4</sup>

Δυστυχώς το γεγονός ότι τα εμπορικά πακέτα είναι κλειστού κώδικα και συνήθως δεν παρέχουν επαρκώς ευέλικτο API για τον έλεγχο της συμπεριφοράς τους και τη χρήση τους από εξωτερικές εφαρμογές μας ανάγκασε να τα απορρίψουμε εξ αρχής.

Επίσης εξετάζεται μια σειρά από μη εμπορικά ΠΕΠ:

- Implicit Parallel Accurate Reservoir Simulator (IPARS)<sup>5</sup>
- Chombo<sup>6</sup>
- deal.II<sup>7</sup>[4]
- FEniCS<sup>8</sup>[10]
- FiPy<sup>9</sup>[6]

<sup>1</sup><http://www.mathworks.com/products/pde>

<sup>2</sup><https://www.comsol.com>

<sup>3</sup><http://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus>

<sup>4</sup><http://www.pdesolutions.com>

<sup>5</sup><http://csm.ices.utexas.edu/lparsiWeb/lparsiintro.html>

<sup>6</sup><https://commons.lbl.gov/display/chombo>

<sup>7</sup><http://www.dealii.org>

<sup>8</sup><http://fenicsproject.org>

<sup>9</sup><http://www.ctcms.nist.gov/fipy>

- HiFlow<sup>310</sup>[2]
- freeFEM++<sup>11</sup>[7]
- OpenModelica<sup>12</sup>[5]
- Overture<sup>13</sup>[8]
- pdelib2<sup>14</sup>
- PETSc<sup>15</sup>[3]

## 2.2 Αξιοποίηση Σύγχρονων Υπολογιστικών Συστημάτων και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης)

### 2.2.1 Χρήση Σύγχρονου Υλικού για την Επίλυση Μεγάλων Αραιών Γραμμικών Συστημάτων

Η αποδοτική επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων με αραιούς πίνακες είναι θεμελιώδους σημασίας για τις υπολογιστικές επιστήμες, αφού τέτοιου είδους συστήματα απαντώνται κατά την επίλυση προβλημάτων του πραγματικού κόσμου (real world problems). Πιο συγκεκριμένα, στα προβλήματα πολλαπλών πεδίων (multidomain/multiphysics problems) αραιοί πίνακες προκύπτουν κατά την διακριτοποίηση μερικών διαφορικών εξισώσεων (ανεξάρτητα της μεθόδου διακριτοποίησης). Έτσι, τα λογισμικά για την προσομοίωση προβλημάτων πολλαπλών μοντέλων φυσικής ενσωματώνουν και μεθόδους για την επίλυση αραιών συστημάτων.

Η διαθέσιμη, κάθε φορά, τεχνολογία υλικού επηρεάζει τις μεθόδους υπολογισμού, πολύ δε περισσότερο, όταν οι υπολογισμοί απαιτούν πολλούς πόρους και ενέχουν χρονικούς περιορισμούς. Όσο αφορά τους υπολογισμούς με αραιούς πίνακες φαίνεται ότι μπορεί να ωφεληθούν σημαντικά από τις επιδόσεις που προσφέρουν οι σύγχρονες GPUs, οι συνεπεξεργαστές (coprocessors) ακόμη και οι multi-core επεξεργαστές. Η επόμενη GPU της NVidia (αρχιτεκτονικής Kepler) αναμένεται ότι θα μπορεί να επιτύχει μέχρι και 1.66Tflops (K40, single GPU), ενώ ο συνεπεξεργαστής Xeon Phi της Intel 1.2Tflops. Οι πιο πρόσφατοι εμπορικοί επεξεργαστές γενικού σκοπού ενσωματώνουν μέχρι και 8 cores και επιτυγχάνουν μέχρι και 1/2 Tflor.

<sup>10</sup><http://www.hiflow3.org>

<sup>11</sup><http://www.freefem.org/ff++>

<sup>12</sup><https://www.openmodelica.org>

<sup>13</sup><http://www.overtureframework.org>

<sup>14</sup><http://www.wias-berlin.de/software/pdelib/about.jsp?lang=1>

<sup>15</sup><http://www.mcs.anl.gov/petsc>

Επερχόμενες τεχνολογίες υλικού όπως το disaggregated server rack υπόσχονται να προσφέρουν νέα περιβάλλοντα για την εκτέλεση υπολογισμών. Η αρχιτεκτονική αυτή προτείνει την αντικατάσταση του κλασσικού server rack, ως συνόλου από διακριτούς εξυπηρετητές, σε σύνολα από διαμοιραζόμενους επεξεργαστές, μνήμη και μονάδες αποθήκευσης συνδεδεμένα μεταξύ τους με οπτικό δίκτυο.

### 2.2.2 Αλγόριθμοι Out-of-Core & Μνήμες Flash

Για την αντιμετώπιση των αυξημένων απαιτήσεων σε μνήμη στις άμεσες μεθόδους, έχουν προταθεί αλγόριθμοι που χρησιμοποιούν δευτερεύουσα μνήμη (αλγόριθμοι out-of-core). Οι περισσότερες βιβλιοθήκες λογισμικού για την επίλυση αραιών συστημάτων με άμεσες μεθόδους (π.χ. INTEL MKL PARDISO, MUMPS, PASTIX, TAUCS) περιλαμβάνουν και τέτοιους αλγορίθμους.

Τα τελευταία χρόνια οι μνήμες flash χρησιμοποιούνται ως αποθηκευτικό μέσο σε ενσωματωμένα συστήματα, κινητά τηλέφωνα, φορητούς υπολογιστές και εξυπηρετητές, έχοντας σαφή πλεονεκτήματα έναντι των παραδοσιακών μαγνητικών δίσκων. Οι εξαιρετικές επιδόσεις τους μας δίνουν κίνητρο να ερευνήσουμε την δυνατότητα αξιοποίησής τους από αλγορίθμους που χρησιμοποιούν εξωτερική μνήμη για την επίλυση αραιών γραμμικών συστημάτων.

Οι μνήμες flash ανήκουν στην κατηγορία των ηλεκτρικά εγγράψιμων και επαναπρογραμματιζόμενων μνημών (EEPROM – electrically erasable programmable read only memory). Οι μνήμες αυτές είναι μη πτητικές (non-volatile) δηλαδή διατηρούν τα περιεχόμενά τους και μετά την διακοπή της τροφοδοσίας τους με ηλεκτρικό ρεύμα. Οι μνήμες flash χρησιμοποιούνται για την μόνιμη αποθήκευση δεδομένων σε ενσωματωμένα συστήματα, κινητές συσκευές και τα τελευταία χρόνια, ως αποθηκευτικά μέσα σε προσωπικούς υπολογιστές και εξυπηρετητές. Η ευρεία διάδοσή τους οφείλεται στις εξαιρετικές επιδόσεις τους σε σύγκριση με τους παραδοσιακούς μαγνητικούς δίσκους, την αντοχή τους σε δονήσεις (shock resistant) και την χαμηλή κατανάλωση ρεύματος.

Υπάρχουν δύο τύποι μνημών flash οι NAND και οι NOR που λαμβάνουν την ονομασία τους από τους αντίστοιχους τύπους λογικών πυλών που χρησιμοποιούν. Οι μνήμες NOR διευθυνσιοδοτούνται σε επίπεδο byte και χρησιμοποιούνται κυρίως για την αποθήκευση κώδικα, ενώ οι NAND διευθυνσιοδοτούνται σε επίπεδο σελίδας (page) και χρησιμοποιούνται για την αποθήκευση δεδομένων. Κάθε κυψέλη (cell) της μνήμης flash μπορεί να αποθηκεύσει ένα (SLC) ή περισσότερα (MLC) bits ανάλογα με τις διαφορετικές καταστάσεις που μπορεί να υποστηρίξει ένα τρανζίστορ. Τα cells οργανώνονται σε σελίδες και οι σελίδες σε μπλοκ. Το τυπικό μέγεθος μια σελίδας κυμαίνεται από 512 Bytes ως 16KB, ενώ ενός μπλοκ από 32KB ως 512KB. Στη συνέχεια του εγγράφου με τον όρο μνήμη flash θα αναφερόμαστε στην κατηγορία NAND.

Οι μνήμες flash έχουν κάποια ιδιαίτερα χαρακτηριστικά: η ανάγνωση και η εγγραφή πραγματοποιείται σε επίπεδο σελίδας ενώ η διαγραφή σε επίπεδο μπλοκ. Η ανάγνωση είναι ταχύτερη από την εγγραφή και η εγγραφή πιο γρήγορη από την διαγραφή. Επιπλέον, μια σελίδα θα πρέπει να διαγραφεί πριν την επανεγγραφή της (δεν υποστηρίζονται in-place updates). Τέλος, η ζωή των μνημών flash περιορίζεται από έναν πεπερασμένο αριθμό κύκλων εγγραφής/διαγραφής.

Οι δίσκοι στερεάς κατάστασης (SSDs), αποθηκευτικές συσκευές που χρησιμοποιούν την μνήμη flash, είναι συμβατοί με τους μαγνητικούς σκληρούς δίσκους. Τα σημαντικότερα μέρη μιας τέτοιας συσκευής είναι τα ολοκληρωμένα κυκλώματα της μνήμης flash και ένας μικροελεγκτής που προσομοιώνει μια διαπαφή τύπου μπλοκ, όμοια με αυτή των σκληρών δίσκων, χρησιμοποιώντας το FTL (Flash Translation Layer). Το FTL αντιστοιχεί τις λογικές διευθύνσεις που χρησιμοποιούνται από τα ανώτερα στρώματα σε φυσικές στα ολοκληρωμένα της flash και υλοποιεί μηχανισμούς για την ανανέωση σελίδων εκτός θέσης (out-of-place updates), για την εξισορρόπηση φθοράς (wear leveling) και ανάκτησης σελίδων (garbage collection). Πιο συγκεκριμένα, ο μηχανισμός ανανέωσης σελίδων εκτός θέσης ικανοποιεί τα αιτήματα ανανέωσης σελίδων πραγματοποιώντας εγγραφές σε «καθαρές» σελίδες (δηλ. σελίδες που έχουν ήδη διαγραφεί) και ανανεώνει κατάλληλα τον πίνακα αντιστοίχισης λογικών και φυσικών διευθύνσεων. Ο μηχανισμός εξισορρόπησης φθοράς κατανέμει ομοιόμορφα τις εγγραφές σε όλο το μέσο, και ο μηχανισμός ανάκτησης σελίδων ανακτά σελίδες που έχουν επισημανθεί ως διαγραμμένες.

Από τα παραπάνω φαίνεται ότι τα αποθηκευτικά μέσα που χρησιμοποιούν μνήμες flash έχουν εξαιρετικές δυνατότητες αλλά και ιδιαίτερα χαρακτηριστικά. Έτσι, οι αλγόριθμοι και οι δομές δεδομένων που έχουν σχεδιαστεί για τους μαγνητικούς δίσκους φαίνεται να χρειάζονται αναθεώρηση. Μάλιστα, ένας σημαντικός αριθμός από επιστημονικές εργασίες έχει δημοσιευθεί στο πεδίο των βάσεων δεδομένων, κυρίως σε δομές ευρετηρίων (indexes) [15, 11, 1, 14, 13] και buffer managers [12, 9], που προσπαθούν να εκμεταλλευτούν τα πλεονεκτήματα της flash (random reads) και να αποσοβήσουν τις ιδιαιτερότητές της (writes πιο αργά από reads).

### 3 Συνεργασίες

Στον Πίνακα 1 συνοψίζονται οι βασικές δραστηριότητες που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της δράσης 4.1 κατά το 2012 και αναφέρονται οι ομάδες που συμμετείχαν.



|                                            | ΚΕΟ 1 | ΚΕΟ 2 | ΚΕΟ 3 |
|--------------------------------------------|-------|-------|-------|
| Προδιαγραφές ΠΕΠ                           | x     | x     | x     |
| Απαιτήσεις για υποστήριξη προβλημάτων MDMP | x     | x     | x     |
| Επισκόπηση GPUs/FPGAs/Flash Storage        |       | x     |       |

Πίνακας 1: Συνεργασίες στα πλαίσια της Δράσης 4.1.

## 4 Παραδοτέα

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

**Ετήσια τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων:** το παρόν κείμενο.

## 5 Μελλοντικές Δράσεις

Το αμέσως επόμενο βήμα στα πλαίσια της δράσης 4.1 είναι η επιλογή κατάλληλου ΠΕΠ το οποίο θα επεκταθεί για τις ανάγκες των προβλημάτων στα οποία στοχεύει το έργο. Επίσης, το ΠΕΠ θα πρέπει να επεκταθεί κατάλληλα ώστε να μπορεί να αξιοποιήσει σύγχρονες τεχνολογίες υλικού, καθώς και απομακρυσμένη εκτέλεση (Grid / Cloud).

## Αναφορές

- [1] D. Agrawal, D. Ganesan, R. Sitaraman, Y. Diao, and S. Singh. Lazy-adaptive tree: An optimized index structure for flash devices. In *Proceedings of VLDB Endowment*, pages 361–372, 2009.
- [2] H. Anzt, W. Augustin, M. Baumann, T. Gengenbach, T. Hahn, A. Helfrich-Schkarbanenko, V. Heuveline, E. Ketelaer, D. Lukarski, A. Nestler, S. Ritterbusch, S. Ronnas, M. Schick, M. Schmidtbreich, C. Subramanian, J.-P. Weiss, F. Wilhelm, and M. Wlotzka. Hiflow3: A hardware-aware parallel finite element package. In Holger Brunst, Matthias S. Müller, Wolfgang E. Nagel, and Michael M. Resch, editors, *Tools for High Performance Computing 2011*, pages 139–151. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [3] 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.
- [4] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II – a general purpose object oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4):24/1–24/27, 2007.
- [5] Peter Fritzson, Peter Aronsson, Håkan Lundvall, Kaj Nyström, Adrian Pop, Levon Saldamli, and David Broman. The OpenModelica Modeling, Simulation, and Software Development Environment. *Simulation News Europe*, 44(45), December 2005.
- [6] Jonathan E. Guyer, Daniel Wheeler, and James A. Warren. FiPy: Partial differential equations with Python. *Computing in Science & Engineering*, 11(3):6–15, 2009.
- [7] F. Hecht. New development in freefem++. *J. Numer. Math.*, 20(3-4):251–265, 2012.
- [8] William D. Henshaw. Overture: An object-oriented system for solving pdes in moving geometries on overlapping grids. In L. Sakell and D. D. Knight, editors, *Proceedings of the First AFOSR Conference on Dynamic Motion CFD*, pages 281–290, June 1996.
- [9] P. Jin, Y. Ou, T. Harder, and Z. Li. Ad-lru: An efficient buffer replacement algorithm for flash-based databases. *Data and Knowledge Engineering*, 72:83–102, 2012.
- [10] Anders Logg, Kent-Andre Mardal, Garth N. Wells, et al. *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2012.
- [11] Y. Lu, J. Li, B. Cui, and X. Chen. Log-compact r-tree: an efficient spatial index for ssd. In *Proceedings of Database Systems for Advanced Applications*, pages 202–213, 2011.
- [12] S.Y. Park, D. Jung, J.U. Kang, J.S. Kim, and J. Lee. Cflru: a replacement algorithm for flash memory. In *Proceedings of the 2006 international conference on Compilers, architecture and synthesis for embedded systems*, pages 234–241. ACM, 2006.
- [13] H. Roh, S. Park, S. Kim, M. Shin, and S.W. Lee. B+-tree index optimization by exploiting internal parallelism of flash-based solid state drives. In *Proceedings of VLDB Endowment*, pages 286–297, 2011.

- [14] N. Wang, P. Jin, S. Wan, Y. Zhang, and L. Yue. Or-tree: An optimized spatial tree index for flash-memory storage systems. *Data and Knowledge Engineering*, pages 1–14, 2012.
- [15] C.H. Wu, T.W. Kuo, and L.P. Chang. An efficient b-tree layer implementation for flash- memory storage systems. *ACM Transactions on Embedded Computing Systems (TECS)*, 19, 2007.

## Παράρτημα Η΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2

# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED- MIS 379416)

### Δράση 4.2

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα  
Ιατρικής



## Περιεχόμενα

|          |                                                                              |           |
|----------|------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Σκοπός</b>                                                                | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Μεθοδολογία</b>                                                           | <b>3</b>  |
| 2.1      | Μαθηματικό Μοντέλο προσομοίωσης καρκινικών όγκων στον Εγκέφαλο . . . . .     | 3         |
| 2.2      | Ασυνεχής Collocation και Αριθμητικά Σχήματα Διακριτοποίησης Χρόνου . . . . . | 5         |
| 2.3      | Λογισμικά Ανοικτού κώδικα . . . . .                                          | 7         |
| <b>3</b> | <b>Αποτελέσματα</b>                                                          | <b>8</b>  |
| 3.1      | Μέθοδος dDHC / Επικύρωση αποτελεσμάτων . . . . .                             | 8         |
| 3.2      | Μέθοδος Φωκά / Επικύρωση αποτελεσμάτων . . . . .                             | 13        |
| 3.3      | Αποτελέσματα επιλογής λογισμικού . . . . .                                   | 13        |
| <b>4</b> | <b>Παραδοτέα</b>                                                             | <b>16</b> |
| <b>5</b> | <b>Συνεργασίες</b>                                                           | <b>17</b> |
| <b>6</b> | <b>Μελλοντικές Δράσεις</b>                                                   | <b>17</b> |

## 1 Σκοπός

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

Την τρέχουσα περίοδο σκοπός μας ήταν η εφαρμογή της μεθόδου που αναπτύξαμε στις δράσεις 2.1 και 2.4 (βλ. Τεχνικές Εκθέσεις 2.1 και 2.4 Έτους 2012) σε προβλήματα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο στις 3 περιοχές (φαιά - λευκή - φαιά ουσία) με  $n$  πηγες στις  $1 + 1$  διαστάσεις όπου παράλληλα επαληθεύσαμε την τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC. Σε αυτήν την κατεύθυνση η dDHC μέθοδος συνδυάστηκε με βασικές μεθόδους διακριτοποίησης χρόνου, όπως η Backward Euler και η Crank Nicolson, αλλά και ένα σχήμα Diagonally Implicit Runge-Kutta τρίτης τάξεως.

Επιπλέον, την περίοδο αυτή ξεκίνησε η αξιολόγηση λογισμικών πακέτων ανοικτού κώδικα σύγχρονων αριθμητικών μεθόδων, η επιλογή της πλατφόρμας πεπερασμένων στοιχείων FEniCS και η εγκατάστασή της στα υπολογιστικά συστήματα του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ (ΕΕΜΗΥ).

## 2 Μεθοδολογία

### 2.1 Μαθηματικό Μοντέλο προσομοίωσης καρκινικών όγκων στον Εγκέφαλο

Τα γλοιώματα αποτελούν τους πιο συχνούς και επιθετικούς όγκους του εγκεφάλου. Το πιο συχνό πρόβλημα στην έγκαιρη διάγνωση και θεραπεία των ασθενών με γλοίωμα είναι η ταχύτατη διήθηση των καρκινικών κυττάρων στο γειτονικό φυσιολογικό ιστό με αποτέλεσμα την αδυναμία εντόπισης του όγκου στα αρχικά στάδια με τις συνήθεις χρησιμοποιούμενες μεθόδους απεικόνισης (μαγνητική και αξονική τομογραφία). Τα παραπάνω λοιπόν αποτέλεσαν κίνητρο για τους επιστήμονες ώστε να μελετήσουν και να κατανοήσουν την ανάπτυξη των γλοιωμάτων. Τις τελευταίες δεκαετίες έχουν αναπτυχθεί μαθηματικά μοντέλα για την προσομοίωση και μελέτη της εξέλιξης ενός καρκινικού όγκου στον εγκέφαλο. Εμείς υιοθετήσαμε το μαθηματικό μοντέλο της Swanson([11],[12],[13]) η οποία πρώτη εισήγαγε στη μοντελοποίηση της ανάπτυξης των γλοιωμάτων την ετερογένεια που υπάρχει στον ιστό του εγκεφάλου. Συγκεκριμένα, ο συντελεστής διάχυσης λαμβάνει διαφορετική τιμή στην περιοχή της φαιάς ουσίας και διαφορετική σε αυτήν της λευκής ουσίας.

Η μαθηματική εξίσωση του μοντέλου είναι:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot (\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) \nabla \bar{c}) + \rho \bar{c} \quad , \quad (1)$$

όπου  $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})$  είναι ο αριθμός των κυττάρων στην θέση  $\bar{\mathbf{x}}$  και τον χρόνο  $\bar{t}$ ,  $\rho$  παριστάνει το ποσοστό της ανάπτυξης των κυττάρων συμπεριλαμβανομένου και του πολλαπλασιασμού τους και της καταστροφής τους και  $\bar{D}(\bar{\mathbf{x}})$  είναι ο συντελεστής διάχυσης των κυττάρων στον ιστό του εγκεφάλου που δίνεται από τη σχέση:

$$\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} D_g & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ ανήκει στη φαιά ουσία} \\ D_w & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ ανήκει στη λευκή ουσία} \end{cases} \quad , \quad (2)$$

με  $D_g$  και  $D_w$  να είναι σταθερές όπου  $D_w > D_g$ .

Στο σύνορο θεωρούμε την ροή να είναι μηδέν και η αρχική πηγή δίνεται από τη σχέση:

$$\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}) = \bar{f}(\bar{\mathbf{x}})$$

Το παραπάνω μαθηματικό μοντέλο έχει διαπιστωθεί ότι προσομοιάζει τη συμπεριφορά ενός πραγματικού καρκινικού όγκου στην διάρκεια του χρόνου πολύ αποτελεσματικά. Εμείς ασχοληθήκαμε με το αδιάστατο πρόβλημα σε μια χωρική διάσταση. Οι αδιαστατές λοιπόν μεταβλητές που χρησιμοποιήσαμε είναι:

$$x = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \quad , \quad t = \rho \bar{t} \quad , \quad c(x, t) = \bar{c} \left( \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x}, \rho \bar{t} \right) \frac{D_w}{\rho N_0} \quad ,$$

$$f(x) = \bar{f} \left( \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \right)$$

όπου  $N_0 = \int \bar{f}(\bar{x}) d\bar{x}$  δηλώνει τον αρχικό ρυθμό καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο για  $\bar{t} = 0$ .

Η εξίσωση λοιπόν το μοντέλου μας διαμορφώνεται ως εξής:

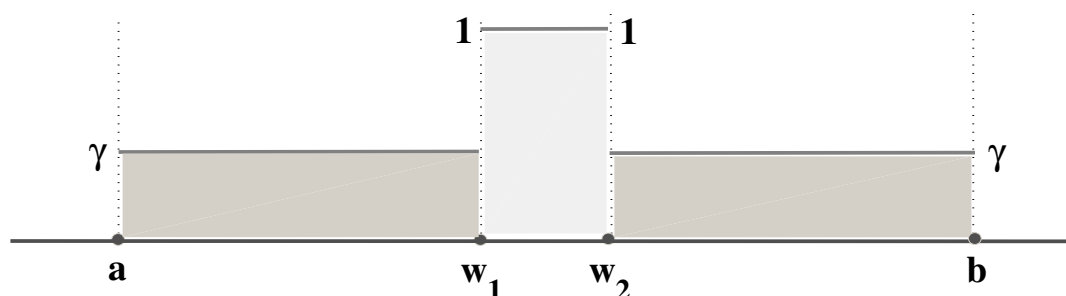
$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c \quad , \quad x \in [a, b] \quad , \quad t \geq 0 \\ c_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b, t) = 0 \\ c(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (3)$$

ή ισοδύναμα αντικαθιστώντας  $c(x, t) = e^t u(x, t)$  έχουμε ότι:

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x \quad , \quad x \in [a, b] \quad , \quad t \geq 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b, t) = 0 \quad . \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases} \quad (4)$$

Ο συντελεστής διάχυσης  $D = D(x)$  είναι της μορφής:

$$D(x) = \begin{cases} \gamma & , \quad a \leq x < w_1 \\ 1 & , \quad w_1 \leq x < w_2 \\ \gamma & , \quad w_2 \leq x \leq b \end{cases} \quad (5)$$



με  $\gamma := \frac{D_g}{D_w} < 1$  να είναι ο αδιάστατος συντελεστής διάχυσης στη φαιά ουσία και 1 ο αδιάστατος συντελεστής διάχυσης στη λευκή ουσία.

Τέλος, η πηγή των καρκινικών κυττάρων αρχικά δίνεται από τη συνάρτηση  $f(x)$

$$f(x) = \sum_{i=1}^k \delta(x - \xi_i) \quad , \quad \xi \in [a, b] \quad , \quad (6)$$

όπου  $\delta(x)$  δηλώνει τη συνάρτηση Dirac.

## 2.2 Ασυνεχής Collocation και Αριθμητικά Σχήματα Διακριτοποίησης Χρόνου

Στη συνέχεια για την αριθμητική επίλυση του παραπάνω μοντέλου με υψηλής τάξεως αριθμητικές μεθόδους χρησιμοποιήσαμε την Hermite Collocation μέθοδο για τη χωρική διακριτοποίηση και τα Backward Euler, Crank Nicolson και Runge Kutta σχήματα για την χρονική διακριτοποίηση. Για να αντιμετωπίσουμε τις ασυνέχειες της πρώτης παραγώγου στα εσωτερικά σημεία διασύνδεσης των περιοχών χρησιμοποιήσαμε τα ασυνεχή Hermite κυβικά πολυώνυμα και διαπιστώσαμε ότι η τάξη συγκλίσης της Collocation παραμένει τετάρτη.

Για ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων της μορφής:

$$\dot{\mathbf{a}} = C(t, \mathbf{a}) \quad (7)$$

όπου  $C(t, \mathbf{a}) = A^{-1}B\mathbf{a}$ .

και θεωρώντας το παραπάνω σύστημα στο χρονικό βήμα  $t = t_{n+1}$ :

$$\dot{\mathbf{a}}^{(n+1)} = C(t_{n+1}, \mathbf{a}^{(n+1)}) \quad (8)$$

όπου

$$C(t_{n+1}, \mathbf{a}^{(n+1)}) = A^{-1} B \mathbf{a}^{(n+1)}$$

με

$$\dot{\mathbf{a}}^{(n+1)} = \begin{bmatrix} \dot{\alpha}_1^{(n+1)} & \dot{\alpha}_3^{(n+1)} & \dots & \dot{\alpha}_{2N+1}^{(n+1)} \end{bmatrix}^T$$

$$\mathbf{a}^{(n+1)} = \begin{bmatrix} \alpha_1^{(n+1)} & \alpha_3^{(n+1)} & \dots & \alpha_{2N+1}^{(n+1)} \end{bmatrix}^T$$

Αρχικά για χρονική διακριτοποίηση χρησιμοποιήσαμε το Backward Euler σχήμα το οποίο έχει τη παρακάτω μορφή:

$$\frac{\mathbf{a}^{(n+1)} - \mathbf{a}^{(n)}}{\tau} = C(t_{n+1}, \mathbf{a}^{(n+1)}) \quad (9)$$

ή ισοδύναμα,

$$(A - \tau B) \mathbf{a}^{(n+1)} = A \mathbf{a}^{(n)} \quad (10)$$

όπου το αρχικό διάνυσμα  $\mathbf{a}^{(0)}$  καθορίζεται από την αρχική συνθήκη που είναι η δέλτα συνάρτηση (6).

Στη συνέχεια χρησιμοποιήσαμε για χρονική διακριτοποίηση το Crank Nicolson (CN) σχήμα το οποίο εκφράζεται ως εξής:

$$\frac{\mathbf{a}^{(n+1)} - \mathbf{a}^{(n)}}{\tau} = \frac{1}{2} (C^{(n+1)}(t, \mathbf{a}) + C^{(n)}(t, \mathbf{a})) \quad (11)$$

ή ισοδύναμα,

$$(A - \frac{\tau}{2} B) \mathbf{a}^{(n+1)} = (A + \frac{\tau}{2} B) \mathbf{a}^{(n)} \quad (12)$$

Τέλος εφαρμόσαμε για την χρονική διακριτοποίηση την μέθοδο Diagonally Implicit Runge Kutta τρίτης τάξεως. Για ένα πρόβλημα αρχικών τιμών της μορφής  $y_t = g(t, y)$ ,  $y(0) = y_0$  η κύρια ιδέα των μεθόδων Runge-Kutta ([4],[6]) είναι να χρησιμοποιήσουν βάρη  $b_i$  και σημεία  $d_i$ ,  $1 \leq i \leq q$  ώστε να προσεγγίσουν τη λύση  $y^{(n+1)}$  από τη  $y^{(n)}$  χρησιμοποιώντας τον τύπο των  $q$  ενδιάμεσων βημάτων :

$$y^{(n+1)} = y^{(n)} + \tau \sum_{i=1}^q b_i g(t^{(n,i)}, y^{(n,i)}) \quad (13)$$

με  $t_{n,i} = t_n + d_i \tau$  και

$$y^{(n,i)} = y^{(n)} + \tau \sum_{j=1}^q a_{ij} g(t^{(n,j)}, y^{(n,j)}) , \quad 1 \leq i \leq q \quad (14)$$

Ο συνδυασμός των τύπων (13) και (14), ορίζουν τη Runge-Kutta μέθοδο όπου οι συντελεστές της μπορούν να γραφούν ως εξής:

$$\begin{array}{ccc|c} a_{11} & \cdots & a_{1q} & d_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{q1} & \cdots & a_{qq} & d_q \\ \hline b_1 & \cdots & b_q & \end{array} \quad (15)$$

Οι ημι-πεπλεγμένες Runge-Kutta μέθοδοι ([4] [6]), χαρακτηρίζονται από την σχέση  $a_{ij} = 0$ ,  $j > i$  και συγκεκριμένα για τις διαγώνια πεπλεγμένες Runge-Kutta μεθόδους (DIRK) [5] ισχύει επιπλέον ότι  $a_{ii} = a$ ,  $i = 1, \dots, q$ . Όπως βλέπουμε στις εργασίες ([1] [5]), είναι γνωστό ότι υπάρχει μία μόνο Α-ευσταθής διαγώνια πεπλεγμένη μέθοδος τρίτης τάξης και δύο βημάτων, όπου περιγράφεται ως εξής:

$$\begin{array}{cc|c} \lambda & 0 & \lambda \\ 1 - 2\lambda & \lambda & 1 - \lambda \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \end{array} \quad (16)$$

με  $\lambda = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}$ .

Αναπτύσσοντας τώρα το (2,3)-DIRK σχήμα, που περιγράφηκε παραπάνω, για τη λύση του DHC συστήματος των συνήθη διαφορικών εξισώσεων (11) ή ισοδύναμα (12), καταλήγουμε στις παρακάτω εξισώσεις:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(n,1)} &= \mathbf{a}^{(n)} + \tau \lambda C^{(n,1)}(t, \mathbf{a}) \\ \mathbf{a}^{(n,2)} &= \mathbf{a}^{(n)} + \tau [(1 - 2\lambda)C^{(n,1)}(t, \mathbf{a}) + \lambda C^{(n,2)}(t, \mathbf{a})] \\ \mathbf{a}^{(n+1)} &= \mathbf{a}^{(n)} + \frac{\tau}{2} [C^{(n,1)}(t, \mathbf{a}) + C^{(n,2)}(t, \mathbf{a})] \end{aligned} \quad (17)$$

ή ισοδύναμα,

$$\begin{aligned} (A - \tau \lambda B) \mathbf{a}^{(n,1)} &= A \mathbf{a}^{(n)} \\ (A - \tau \lambda B) \mathbf{a}^{(n,2)} &= A \mathbf{a}^{(n)} + \tau (1 - 2\lambda) B \mathbf{a}^{(n,1)} \\ A \mathbf{a}^{(n+1)} &= A \mathbf{a}^{(n)} + \frac{\tau}{2} [B \mathbf{a}^{(n,1)} + B \mathbf{a}^{(n,2)}] \end{aligned} \quad (18)$$

## 2.3 Λογισμικά Ανοικτού κώδικα

Σε αυτή την ερευνητική δραστηριότητα έγινε επίσης, μελέτη των δυνατοτήτων λογισμικών ανοικτού κώδικα [16] υλοποίησης αριθμητικών μεθόδων πεπερασμένων στοιχείων υψηλής ακρίβειας επίλυσης μερικών διαφορικών εξισώσεων για την επιλογή κατάλληλου λογισμικού μελέτης προβλημάτων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου. Τα κριτήρια επιλογής του λογισμικού ήταν:



- Φάσμα επιλογής συναρτήσεων βάσης για μεθόδους Πεπερασμένων Στοιχείων
- Δυνατότητα επεξεργασίας γενικευμένης γεωμετρίας πεδίου ορισμού
- Γλώσσες προγραμματισμού
- Τεκμηρίωση
- Δυνατότητα επέκτασης των βιβλιοθηκών λογισμικού

### 3 Αποτελέσματα

#### 3.1 Μέθοδος dDHC / Επικύρωση αποτελεσμάτων

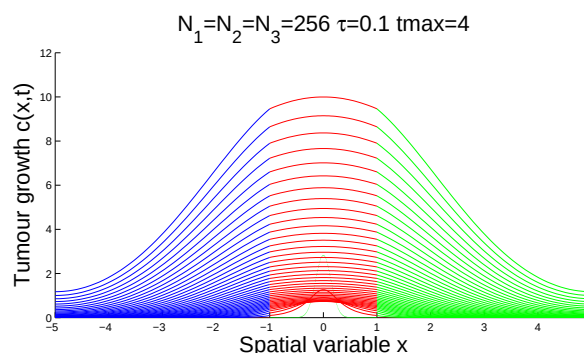
Σε αυτή την ενότητα μελετάμε αριθμητικά την απόδοση της collocation μεθόδου (DHC) με ασυνεχή πολυώνυμα Hermite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με τα χρονικά σχήματα (BE), (CN) και (2,3)-DIRK στα ακόλουθα προβλήματα:

##### Πρόβλημα 1

$$a = -5, w_1 = -1, w_2 = 1, b = 5, \gamma = 0.5$$

$$\text{και } f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}} e^{-x^2/\eta^2},$$

Η ανάπτυξη του καρκινικού όγκου στο χρόνο και για μέγιστο χρόνο  $t_{max} = 4$  δηλαδή πραγματικού χρόνου περίπου ενός έτους δίνεται από το παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 1: Η απόδοση της μεθόδου (DHC)/(BE)

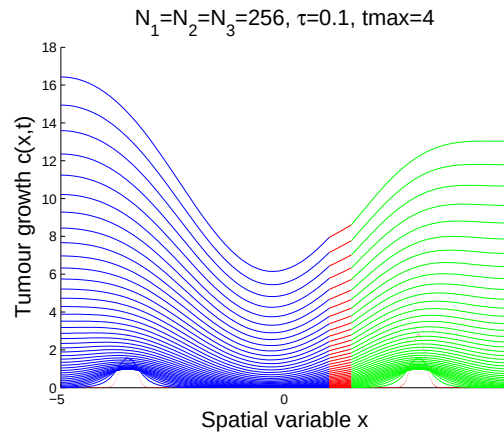
##### Πρόβλημα 2



$$a = -5, w_1 = 1, w_2 = 1.5, b = 5, \gamma = 0.5$$

$$\text{και } f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}}(e^{-(x+3.5)^2/\eta^2} + e^{-(x-3)^2/\eta^2}) ,$$

Στο παρακάτω γράφημα παρουσιάζεται η συμπεριφορά της λύσης για το δεύτερο πρόβλημα:



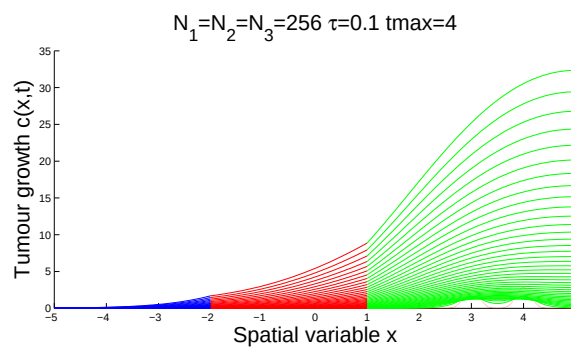
Σχήμα 2: Η απόδοση της μεθόδου (DHC)/(CN)

### Πρόβλημα 3

$$a = -5, w_1 = -2, w_2 = 1, b = 5, \gamma = 0.5$$

$$\text{και } f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}}(e^{-(x-3)^2/\eta^2} + e^{-(x-4)^2/\eta^2}) ,$$

Αντίστοιχα, η λύση του παραπάνω προβλήματος φαίνεται στο Σχ. (3).



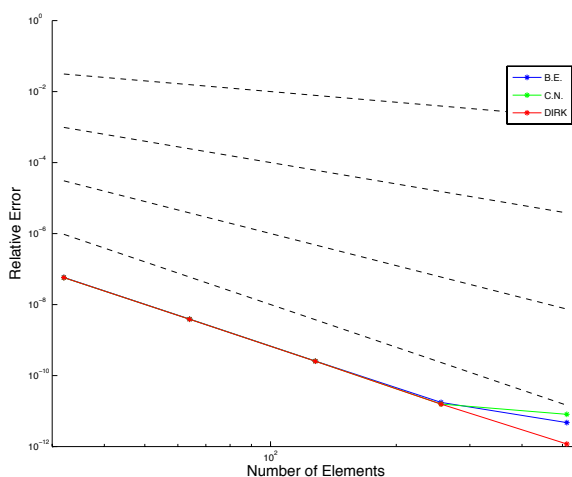
Σχήμα 3: Η απόδοση της μεθόδου (DHC)/(DIRK)

Σε όλα τα προβλήματα το  $\eta = 0.2$ .

Η τάξη σύγκλισης της collocation μεθόδου (DHC) με ασυνεχή πολυώνυμα Hermite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με όλες τις μεθόδους χρονικής διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στα σχήματα (4), (5) και (6) διατηρείται τετάρτης τάξεως όπως και στη συνεχή μέθοδο Collocation.

Αντίστοιχα η τάξη σύγκλισης των χρονικών μεθόδων διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στα σχήματα (7), (8) και (9), παρέμεινε ένα για την BE, δύο CN και τρία για την DIRK. Το  $N_t$  συμβολίζει το πλήθος των χρονικών βημάτων μεταξύ του  $t = 0$  και του  $t = 4$ .

Τέλος παρουσιάζονται οι πίνακες T1, T2 και T3 με τους χρόνους των πειραμάτων για διάφορες πυκνώσεις του πλέγματος ανά περιοχή, για τα τρία παραπάνω προβλήματα αντίστοιχα και για όλα τα σχήματα χρονικής διακριτοποίησης.

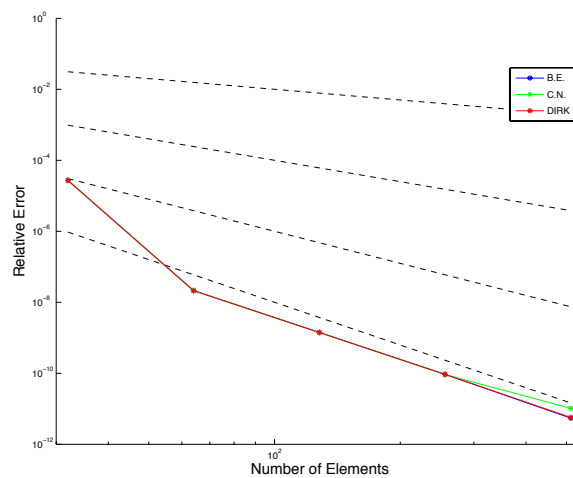


Σχήμα 4: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 1.

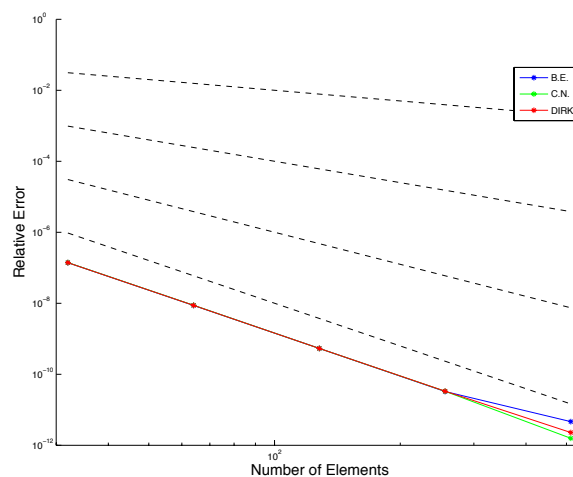
Διαπιστώσαμε λοιπόν, μέσα από μία σειρά αριθμητικών πειραμάτων, ότι η τάξη σύγκλισης της μεθόδου collocation, με ασυνεχή στοιχεία Hermite, παρέμεινε τέταρτη, χωρίς να επηρεάζεται από την παρουσία των ασυνεχών στοιχείων. Όσο αφορά τα χρονικά σχήματα, η τάξης σύγκλισης ταυτίζεται με τη θεωρητικά αναμενόμενη. Τέλος παρατηρήθηκε το γνωστό πρόβλημα της εμφάνισης ταλαντώσεων κατά τα αρχικά χρονικά βήματα της μεθόδου Crank-Nicolson.

Στο μοντέλο (4), θεωρούμε:

$$\begin{aligned} a &= -5, \quad w_1 = -1, \quad w_2 = 1, \quad b = 5, \\ \gamma &= 0.2 \quad \text{και} \quad \gamma = 0.5 \\ u(x, 0) &= \delta(x + 3) \quad \text{και} \quad u(x, 0) = \delta(x + 4) + \delta(x - 2) . \end{aligned} \quad (19)$$

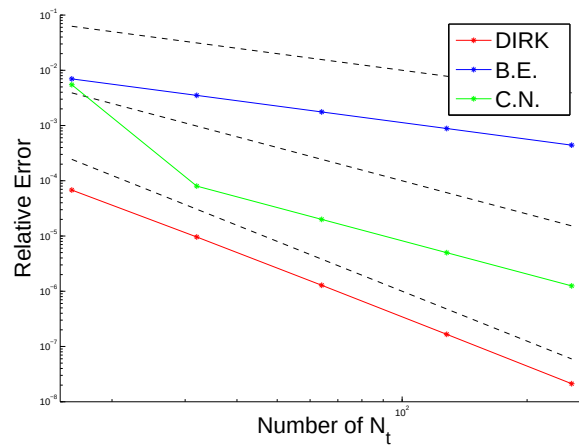


Σχήμα 5: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 2.

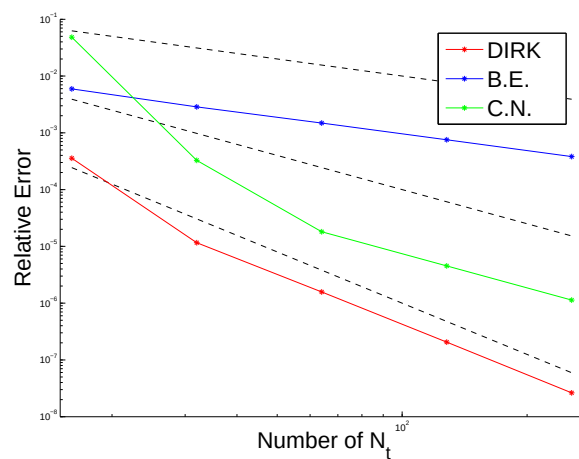


Σχήμα 6: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 3.

Σε όλα τα αριθμητικά πειράματα ο χρόνος  $t$  φτάνει μέχρι  $t_{max} = 4$ , που αντιστοιχεί σε περίπου 1 έτος πραγματικού χρόνου (11 μήνες 3 μέρες και 8 ώρες για την ακρίβεια), που θεωρείται ο προσδόκιμος χρόνος για υψηλής διαβάθμισης κακοήθειες. Στον πίνακα που ακολουθεί, δείχνουμε την σχέση μεταξύ του αδιάστατου

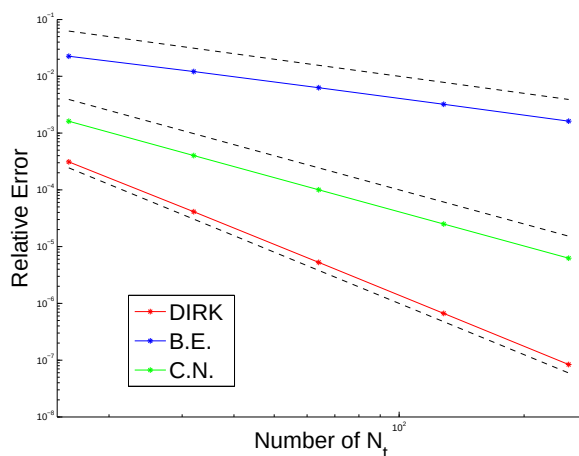


Σχήμα 7: Τάξη σύγκλισης της χρονικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 1.



Σχήμα 8: Τάξη σύγκλισης της χρονικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 2.

και του πραγματικού χρόνου:



Σχήμα 9: Τάξη σύγκλισης της χρονικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 3.

### 3.2 Μέθοδος Φωκά / Επικύρωση αποτελεσμάτων

Υλοποιώντας την παραπάνω διαδικασία, η εξέλιξη της πυκνότητας του όγκου

$$c(x, t) = e^t u(x, t)$$

μπορεί να παρατηρηθεί αριθμητικά, όπως φαίνεται στο σχήμα 10 για  $0.2 \leq t \leq 4$  με χρονικό βήμα  $dt = 0.2$ . Στο σχήμα 10, διαφορετικές γραμμές αναπαριστούν την πυκνότητα του όγκου σε διαφορετικές χρονικές στιγμές. Ο συντελεστής διάχυσης  $\gamma$  έχει τεθεί  $\gamma = 0.5$  στα σχήματα 10a και 10c, ενώ στα σχήματα 10b και 10d έχει τεθεί  $\gamma = 0.2$ . Η αρχική πυκνότητα του όγκου θεωρείται  $u(x, 0) = \delta(x+3)$  στα σχήματα 10a και 10b, και  $u(x, 0) = \delta(x+4) + \delta(x-2)$  στα σχήματα 10c και 10d. Παρατηρείστε ότι σε όλες τις περιπτώσεις η φαιά ουσία (κόκκινη περιοχή) συμπεριφέρεται ως επιταχυντής ανάπτυξης.

### 3.3 Αποτελέσματα επιλογής λογισμικού

Στις πιο κατάλληλες πλατφόρμες λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων ενδιαφέροντος συγκαταλέγονται τα: Deal.II, DUNE, FEATool και FeníCS. Η πλατφόρμα λογισμικού που επελέγη προς χρήση, μετά από μελέτη και πρόταση από την ΚΕΟ 2 του έργου, είναι η πλατφόρμα πεπερασμένων στοιχείων FeníCS [17]. Η πλατφόρμα FeníCS ικανοποιεί κατά το πλείστον τα κριτήρια επιλογής που θέσαμε στη παράγραφο 2.3 καθώς:

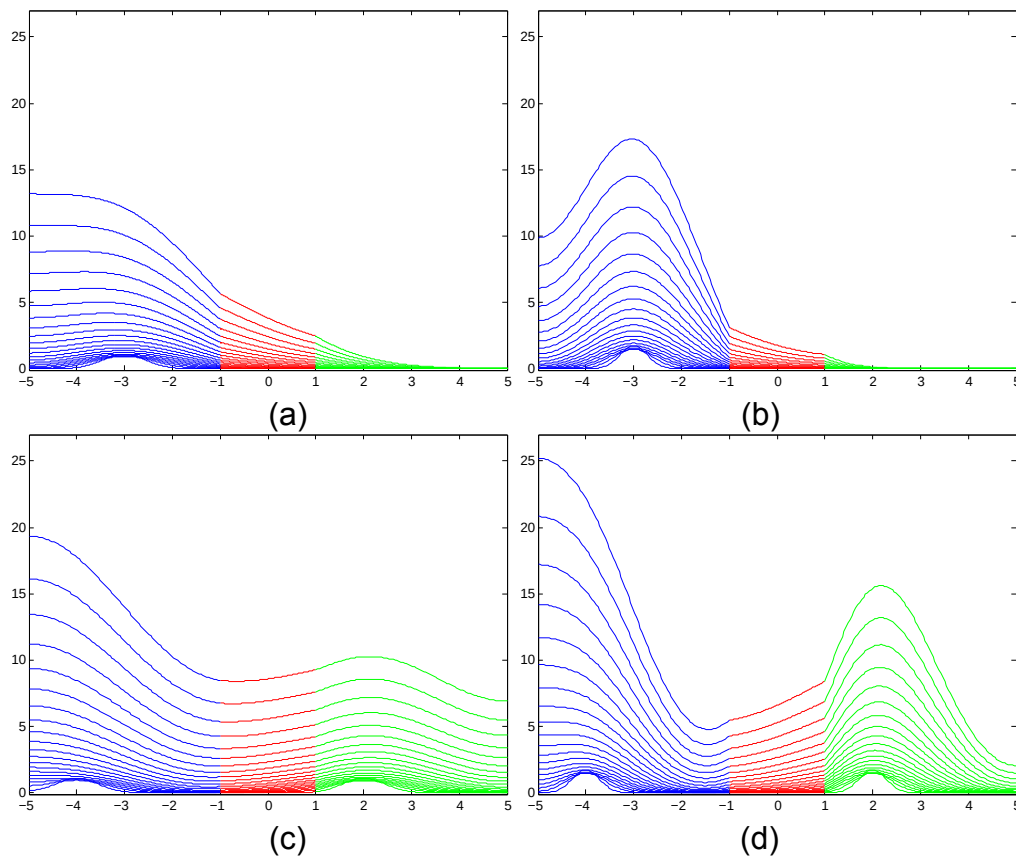
| T1  | Πρόβλημα 1 |        |        |
|-----|------------|--------|--------|
|     | B.E.       | C.N.   | DIRK   |
| 64  | 0.2445     | 0.2481 | 0.2886 |
| 128 | 0.2692     | 0.2700 | 0.2797 |
| 256 | 0.3159     | 0.3193 | 0.3317 |
| 512 | 0.4050     | 0.4128 | 0.4359 |

| T2  | Πρόβλημα 2 |        |        |
|-----|------------|--------|--------|
|     | B.E.       | C.N.   | DIRK   |
| 64  | 0.2504     | 0.2492 | 0.2560 |
| 128 | 0.2689     | 0.2756 | 0.2804 |
| 256 | 0.3170     | 0.3242 | 0.3283 |
| 512 | 0.4111     | 0.4199 | 0.4269 |

| T3  | Πρόβλημα 3 |        |        |
|-----|------------|--------|--------|
|     | B.E.       | C.N.   | DIRK   |
| 64  | 0.2447     | 0.2520 | 0.2549 |
| 128 | 0.2694     | 0.2736 | 0.2820 |
| 256 | 0.3174     | 0.3215 | 0.3328 |
| 512 | 0.4105     | 0.4248 | 0.4278 |

| Αδιάστατος Χρόνος | Πραγματικός Χρόνος |
|-------------------|--------------------|
| $t = 0.01$        | 20 ώρες            |
| $t = 0.1$         | $\approx 8$ μέρες  |
| $t = 1$           | $\approx 3$ μήνες  |
| $t = 4$           | $\approx 1$ χρόνος |
| $t = 10$          | $\approx 2$ χρόνια |

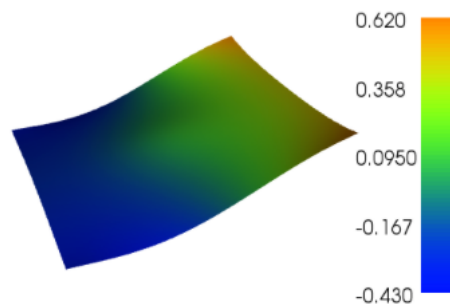
- χρησιμοποιεί τις διαδεδομένες γλώσσες προγραμματισμού C++ ή python για την περιγραφή των προβλημάτων επίλυσης
- διαθέτει σύγχρονες υλοποιήσεις αριθμητικών μεθόδων πεπερασμένων στοιχείων μέσω των οποίων είναι εφικτή η επίλυση multi physics, multidomain προβλημάτων
- διαθέτει μια πολύ δραστήρια ομάδα υποστήριξης και εξέλιξης του λογισμικού από τα μεγαλύτερα πανεπιστημιακά και ερευνητικά ιδρύματα
- δυνατότητα επέκτασης των βιβλιοθηκών των μεθόδων



Σχήμα 10: Χρονική εξέλιξη του πυκνότητας του όγκου  $c(x, t)$  για  $t = 0.2 : 0.2 : 4$

- διαθέτει ένα πολύ αναλυτικό αποθετήριο σχετικών συγγραμμάτων τεκμηρίωσης
- διατίθεται [18] αναλυτικός οδηγός χρήσης και εφαρμογών.

Η πλατφόρμα λογισμικού FeniCS εγκαταστάθηκε σε υπολογιστικά συστήματα και εξυπηρετητές (διαφορετικών λειτουργικών συστημάτων) του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ (ΕΕΜΗΥ) προς χρήση από τα μέλη και συνεργάτες της ΚΕΟ 1. Για την πιστοποίηση της σωστής εγκατάστασης και λειτουργίας της πλατφόρμας στα συστήματα του ΕΕΜΗΥ έγιναν πολλές πειραματικές δοκιμές από τις οποίες ενδεικτικά παρατίθεται η επίλυση ενός Poisson ελλειπτικού προβλήματος, με Neumann συνοριακές συνθήκες, η λύση του οποίου επιδεικνύεται στο Σχ. 1 ενώ ο κώδικας επίλυσης του σε ργθση εμφανίζεται στο Σχ. 2.



Σχήμα 11: Γράφημα λύσης προβλήματος δοκιμής σε FeniCS

```

from dolfin import *

# Create mesh and define function space
mesh = UnitSquareMesh(64, 64)
V = FunctionSpace(mesh, "CG", 1)
R = FunctionSpace(mesh, "R", 0)
W = V * R

# Define variational problem
(u, c) = TrialFunction(W)
(v, d) = TestFunctions(W)
f = Expression("10*exp(-(pow(x[0] - 0.5, 2) + pow(x[1] - 0.5, 2)) / 0.02)")
g = Expression("-sin(5*x[0])")
a = (inner(grad(u), grad(v)) + c*v + u*d)*dx
L = f*v*dx + g*v*ds

# Compute solution
w = Function(W)
solve(a == L, w)
(u, c) = w.split()

# Plot solution
plot(u, interactive=True)

```

Σχήμα 12: Κώδικας επίλυσης προβλήματος δοκιμής σε python

## 4 Παραδοτέα

- Παπαδομανωλάκη Μαρία " Η μέθοδος Collocation για παραβολικές μερικές διαφορικές εξισώσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης: στην κατεύθυνση προσομοίωσης καρκινικών όγκων εγκεφάλου." Διδακτορική Διατριβή 2012.
- Δ. Μαντζαβίνος, Μ. Παπαδομανωλάκη, Ι. Σαριδάκης, Α. Σηφαλάκης "Fokas

transform method for a brain tumor invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions” .Applied Numerical Mathematics, doi:10.1016/j.apnum.2014.09.006

- Ανάπτυξη Λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB και Fortran.
- Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση
- Εγκατάσταση και διαρκή αναβάθμιση σε νεότερες εκδόσεις του λογισμικού σε προσωπικά υπολογιστικά συστήματα των μελών της ερευνητικής ομάδας του ΠΚ για λειτουργικά συστήματα Linux και Mac OS-X, καθώς και σε ένα Linux server του ΕΕΜΗΥ.

## 5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, επ.καθ. Ε. Μαθιουδάκη, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη, Δρ. Α. Σηφαλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη. Επίσης για την επιλογή του κατάλληλου λογισμικού υπήρξε συνεργασία μελών όλων των ερευνητικών ομάδων καθώς η χρήση αυτού του λογισμικού θα γίνει από όλες τις ομάδες.

## 6 Μελλοντικές Δράσεις

- Εφαρμογή της dDHC και της μεθόδου Φωκά σε μαθηματικό μοντέλο διάχυσης καρκινικών όγκων  $N$  περιοχών και αρχικών πηγών στις  $1 + 1$  διαστάσεις
- Εφαρμογή σε μη γραμμικά μοντέλα Βιολογικής Εισβολής πληθυσμών.
- Εφαρμογή σε μοντέλα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο  $2 + 1$  διαστάσεων.

## Αναφορές

- [1] R. Alexander “Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE’s,” *SIAM Num. Anal.*, vol. 14 no. 6, pp. 1006-1021, 1977.
- [2] C. de Boor and B. Swartz “Collocation at Gaussian points,” *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.

- [3] P.K.Burgess,P.M.Kulesa,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr. "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas," *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology* , vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.
- [4] J.C.Butcher "Implicit Runge-Kutta processes ," *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.
- [5] M. Crouzeix"" Sur l'approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par desmethodes de Runge Kutta," *PHD Thesis, Univercity Paris VI, Paris*,1975.
- [6] J.C.Butcher "The numerical analysis of ordinary differential equations ," *John Wiley* , 1987.
- [7] 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.
- [8] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [9] M.G. Papadomanolaki and Y.G. Saridakis "Collocation with discontinuous Hermite elements for a tumour invasion model with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions," in *Proceedings of Numan2010 conference "Conference in Numerical Analysis"* , pp. 238-245, 2010.
- [10] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.
- [11] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.

- [15] 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.
- [16] [https://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_finite\\_element\\_software\\_packages](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_finite_element_software_packages).
- [17] <http://www.fenicsproject.org>.
- [18] Logg, Anders, Mardal, Kent-Andre, Wells, Garth *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*,Lecture Notes in Computational Science and Engineering, (84), Springer, 2012.

## Παράρτημα Θ' Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3



# Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2012



## ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

Πλατφόρμα προηγμένων μαθηματικών μεθόδων  
και λογισμικού για την επίλυση προβλημάτων  
πολλαπλών πεδίων (multi physics, multidomain)  
σε σύγχρονες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές:  
Εφαρμογή σε προβλήματα Περιβαλλοντικής  
Μηχανικής και Ιατρικής (MATENVMED - MIS  
379416)

### Δράση 4.3

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα  
Περιβαλλοντικής Μηχανικής



## Περιεχόμενα

|          |                                                              |           |
|----------|--------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>1</b> | <b>Σκοπός</b>                                                | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Μεθοδολογία</b>                                           | <b>3</b>  |
| 2.1      | Παράκτιος υδροφορέας περιοχής Βαθέως Καλύμνου . . . . .      | 3         |
| 2.2      | Υφαλμύριση παράκτιων υδροφορέων . . . . .                    | 3         |
| 2.3      | Οι εξισώσεις του μαθηματικού μοντέλου . . . . .              | 4         |
| 2.4      | Αναλυτική λύση . . . . .                                     | 6         |
| 2.5      | Ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX II . . . . . | 7         |
| 2.6      | Αποτελέσματα αριθμητικής προσομοίωσης . . . . .              | 7         |
| <b>3</b> | <b>Συμπεράσματα</b>                                          | <b>9</b>  |
| <b>4</b> | <b>Μελλοντικές Δράσεις</b>                                   | <b>9</b>  |
| <b>5</b> | <b>Παραδοτέα</b>                                             | <b>10</b> |
| <b>6</b> | <b>Συνεργασίες</b>                                           | <b>10</b> |

## 1 Σκοπός

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης αποτελεί αφενός μεν η επικύρωση των αποτελεσμάτων μας (αποδοτικότητα μεθόδων και λογισμικού) με ένα σημαντικό περιβαλλοντικό πρόβλημα, αυτό της διείσδυσης αλμυρού νερού στο εσωτερικό υδροφορέων γνωστό ως φαινόμενο της υφαλμύρισης, αφετέρου δε την ανάπτυξη λογισμικού για τη μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης του υδροφορέα με υψηλής ακρίβειας μεθόδους αλλά και αλγορίθμους βελτιστοποίησης.

Την τρέχουσα περίοδο ξεκινήσαμε τη μελέτη της βέλτιστης διαχείρισης ενός αναλυτικού μοντέλου ορθογώνιου υδροφορέα μέσω του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX II.

## 2 Μεθοδολογία

Ο βασικός στόχος της εργασίας αυτής είναι η διερεύνηση της δυνατότητας εφαρμογής ενός στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης στο πρόβλημα ελέγχου των αντλήσεων γλυκού νερού στο εσωτερικό ενός υδροφορέα. Η αρχική μας μελέτη, την περίοδο αυτή, αναφέρεται στην συμπεριφορά του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης AL.O.P.EX. ALgorithm Of Pattern EXtraction) II, με τον οποίο μέλη της ερευνητικής ομάδας έχουν πειραματιστεί στο παρελθόν σε προβλήματα πραγματικού χρόνου (βλ. [4]) με εξαιρετικά αποτελέσματα, και ένα δοκιμαστικό υδροφορέα ορθογώνιας γεωμετρίας, που προσεγγίζει έναν πραγματικό υδροφορέα ευρισκόμενο στην περιοχή Βαθύ της Καλύμνου.

### 2.1 Παράκτιος υδροφορέας περιοχής Βαθέως Καλύμνου

Στη Καλύμνου βρίσκεται ο υδροφορέας που παρουσιάζεται στο Σχήμα 1. Για διευκόλυνση της διαδικασίας μοντελοποίησης θεωρούμε ότι ο υδροφορέας αυτός μπορεί να προσεγγιστεί από έναν υδροφορέα ορθογώνιας γεωμετρίας, με ενιαία τιμή υδραυλικής αγωγιμότητας στο εσωτερικό του.

### 2.2 Υφαλμύριση παράκτιων υδροφορέων

Η ροή του νερού στο εσωτερικό ενός υδροφορέα είναι μια σύνθετη διαδικασία, καθώς συνυπάρχουν δύο διαφορετικές καταστάσεις του νερού, με υδραυλικές ιδιότητες που εμφανίζουν μεγάλη διακύμανση κατά μήκος του υδροφορέα. Στην παρούσα εργασία ακολουθούμε τη μοντελοποίηση που συναντάμε στο [2], η οποία βασίζεται:



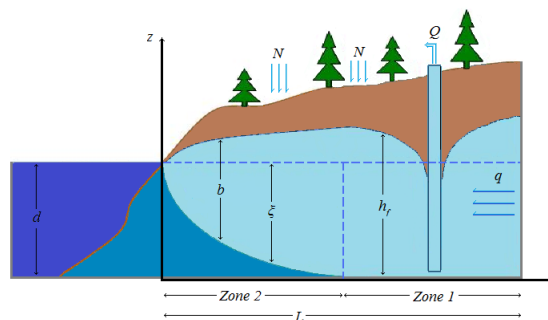


Σχήμα 1: Παράκτιος υδροφορέας γλυκού νερού στην περιοχή Βαθύ Καλύμνου.

- στην προσέγγιση Sharp Interface, δηλαδή δεχόμαστε ότι δεν υπάρχει απευθείας ανάμειξη γλυκού και αλμυρού νερού στο εσωτερικό του υδροφορέα
- στην εξίσωση των Ghyben-Herzberg η οποία, υποθέτοντας ότι η ροή του νερού προσεγγίζει την σταθερή κατάσταση (steady state), υπολογίζει την καμπύλη διεπαφής μεταξύ του αλμυρού και γλυκού νερού.

## 2.3 Οι εξισώσεις του μαθηματικού μοντέλου

Το μοντέλο προσομοίωσης Sharp Interface έχω ως βασική παραδοχή την μη-ανάμειξη γλυκού και αλμυρού νερού στη ζώνη 2 (βλέπε Σχήμα 2). Επιπρο-



Σχήμα 2: Παράκτιος υδροφορέας γλυκού νερού. Παράμετροι μοντελοποίησης.

σθέτως, θεωρώντας ότι η ροή του νερού φτάνει σε steady state κατάσταση έπειτα από κάποιο χρονικό διάστημα, μας δίνεται η δυνατότητα να χρησιμοποιήσουμε την εξίσωση των Ghyben-Herzberg:

$$h_f - d = \delta \xi, \quad \delta := \frac{\rho_s - \rho_f}{\rho_f} \approx 0.025 \quad (1)$$

όπου  $\rho_s$  και  $\rho_f$  δηλώνουν τις πυκνότητες του αλατισμένου και του γλυκού νερού αντίστοιχα.

Η βασική εξίσωση του μοντέλου είναι η ακόλουθη:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( Kb \frac{\partial h_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( Kb \frac{\partial h_f}{\partial y} \right) + N - Q = 0, \quad (2)$$

όπου το  $b$  ικανοποιεί τις σχέσεις:

$$\text{Zone 1: } b = h_f, \quad (3)$$

$$\text{Zone 2: } b = h_f - d + \xi.$$

Το δυναμικό ροής  $\phi = \phi(x, y)$  (βλέπε [2, 3]) στο εσωτερικό του υδροφορέα ορίζεται ως εξής:

$$\text{Zone 1: } \phi = \frac{1}{2} (h_f^2 - (1 + \delta)d^2), \quad (4)$$

$$\text{Zone 2: } \phi = \frac{1+\delta}{2\delta} (h_f - d)^2,$$

ενώ στην περιοχή του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας, όπου  $\xi = d$ :

$$\phi_\tau = \phi(x_\tau, y_\tau) = \frac{(1 + \delta)\delta}{2} d^2. \quad (5)$$

Το δυναμικό ροής  $\phi = \phi(x, y)$  είναι μια συνεχής και ομαλή συνάρτηση κατά μήκος του συνόρου των ζωνών 1 και 2, ικανοποιώντας την εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + N - Q = 0, \quad (6)$$

με Dirichlet συνοριακές συνθήκες  $\phi = 0$  κατά μήκος της ακτογραμμής ( $x = 0$ ) και Neumann συνοριακές συνθήκες  $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$  στις περιοχές όπου δεν εμφανίζεται εισροή ύδατος στον υδροφορέα.

Εάν οι τιμές των παραμέτρων  $K$ ,  $N$ ,  $Q$  και οι συνοριακές συνθήκες είναι γνωστές, η προηγούμενη εξίσωση μπορεί να επιλυθεί ως προς  $\phi(x, y)$ , χρησιμοποιώντας αναλυτικές ή αριθμητικές μεθόδους.

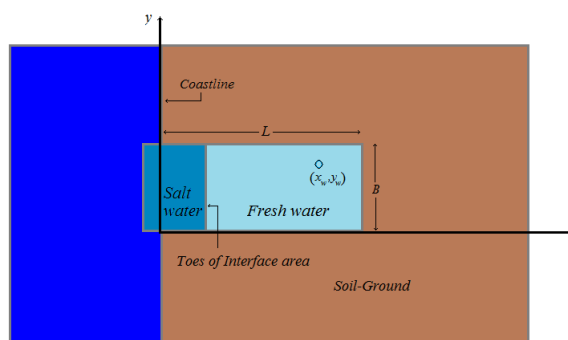
$$\text{Zone 1: } z = 0, \quad h_f = \sqrt{2\phi + (1 + \delta)d^2}, \quad \text{for } \frac{(1+\delta)\delta}{2} d^2 \leq \phi,$$

$$\text{Zone 2: } z = d - \xi, \quad \xi = \sqrt{\frac{2\phi}{\delta(1+\delta)}} \quad \text{and} \quad h_f = \sqrt{\frac{2\phi}{1+\delta}} + d, \quad \text{for } 0 \leq \phi \leq \frac{(1+\delta)\delta}{2} d^2, \quad (7)$$

Το μέτωπο της υφάλμυρης σφήνας μπορεί να υπολογισθεί, επιλύοντας ως προς  $x_\tau$  την μη-γραμμική εξίσωση (5) που παρουσιάσαμε παραπάνω.

## 2.4 Αναλυτική λύση

Η παρούσα εργασία εστιάζεται στη μελέτη ομοιογενών υδροφορέων (ως προς την παράμετρο της υδραυλικής αγωγιμότητας), ορθογώνιας γεωμετρίας, πεπερασμένου μεγέθους, με ένα άκρο στη θάλασσα και τρία άλλα αδιαπέραστα σύνορα. Η αναλυτική λύση της ροής δυναμικού που παρουσιάζεται στις εργασίες



Σχήμα 3: Ομοιογενής υδροφορέας ορθογώνιας γεωμετρίας.

των Strack ([3]) και Μαντόγλου ([2]), χρησιμοποιείται στο σημείο αυτό ως βασική εξίσωση εργασίας:

$$\begin{aligned} \phi(x, y) = & \frac{q}{K}x + \frac{N}{K}x(L - \frac{x}{2}) + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^M \frac{Q_j}{4\pi K} \ln \left( \frac{a_{i,j}(x) + b_{k,j}(y)}{a_{i+1,j}(x) + b_{k,j}(y)} \right) + \\ & + \sum_{n=1}^2 \sum_{k=3}^6 \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^M \frac{Q_j}{4\pi K} \ln \left( \frac{a_{i,j}(x) + b_{k,n,j}(y)}{a_{i+1,j}(x) + b_{k,n,j}(y)} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

όπου

$$\begin{aligned} a_{1,j}(x) &:= (x - x_j)^2 & b_{1,j}(y) &:= (y - y_j)^2 \\ a_{2,j}(x) &:= (x + x_j)^2 & b_{2,j}(y) &:= (y + y_j)^2 \\ a_{3,j}(x) &:= (x - (2L - x_j))^2 & b_{3,n,j}(y) &:= (y - (2nB - y_j))^2 \\ a_{4,j}(x) &:= (x - (2L + x_j))^2 & b_{4,n,j}(y) &:= (y - (2nB + y_j))^2 \\ a_{5,j}(x) &:= (x + (2L + x_j))^2 & b_{5,n,j}(y) &:= (y + (2nB - y_j))^2 \\ a_{6,j}(x) &:= (x + (2L - x_j))^2 & b_{6,n,j}(y) &:= (y + (2nB + y_j))^2 \end{aligned} \quad (9)$$

Τα  $Q_j$  δηλώνουν ρυθμούς άντλησης ( $m^3/day$ ) της  $j - th$  ενεργούς γεώτρησης  $w_j$ ,  $j = 1, \dots, M$ , με συντεταγμένες  $(x_j, y_j)$ .

## 2.5 Ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX II

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης της διαδικασίας αντλήσεων, όπως παρατίθεται στην εργασία [2], έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{aligned} \max: \quad & S \equiv S(\mathbf{Q}) = \sum_{i=1}^M Q_i \\ \text{s.t.:} \quad & 0 \leq \underline{Q}_i \leq Q_i \leq \bar{Q}_i < Q_A \\ & S(\mathbf{Q}) \leq Q_A \\ & x_{\tau,i} \leq x_i \quad i = 1, \dots, M \end{aligned} \quad (10)$$

όπου  $S$  δηλώνει την αντικειμενική συνάρτηση,  $\underline{Q}_i$  και  $\bar{Q}_i$  είναι οι ελάχιστες και μέγιστες δυνατότητες αντλήσεως, αντίστοιχα, της  $i^{th}$  γεωτρήσεως,  $Q_A$  είναι η συνολική δυνατότητα αντλήσεως από ολόκληρο τον υδροφορέα,  $x_{\tau,i}$  είναι η  $x$ -συντεταγμένη του υφάλμυρου μετώπου απέναντι από την  $i^{th}$  γεώτρηση και  $d_s$  μια προκαθορισμένη απόσταση ασφάλειας.

Ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης που χρησιμοποιούμε, όπως αναφέραμε και προηγουμένως, είναι η έκδοση ALOPEX II, με εξίσωση:

$$\mathbf{Q}^{(k)} = \mathbf{Q}^{(k-1)} + c \Delta S^{(k-1)} \Delta \mathbf{Q}^{(k-1)} + \mathbf{g}^{(k)}, \quad k = 2, 3, \dots \quad (11)$$

όπου

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{Q}^{(k)} &= \mathbf{Q}^{(k)} - \mathbf{Q}^{(k-1)} \\ \Delta S^{(k)} &= S(\mathbf{Q}^{(k)}) - S(\mathbf{Q}^{(k-1)}) \end{aligned} \quad (12)$$

Οι παράμετροι  $c$  και  $\mathbf{g}^{(k)}$ , οι τιμές των οποίων διαμορφώνονται έπειτα από πλήθος αριθμητικών μοντελοποιήσεων και δοκιμών, αντιπροσωπεύουν τη συνεισφορά των προηγούμενων επαναλήψεων του ALOPEX στην εύρεση των αποτελεσμάτων της τελευταίας επανάληψης.

## 2.6 Αποτελέσματα αριθμητικής προσομοίωσης

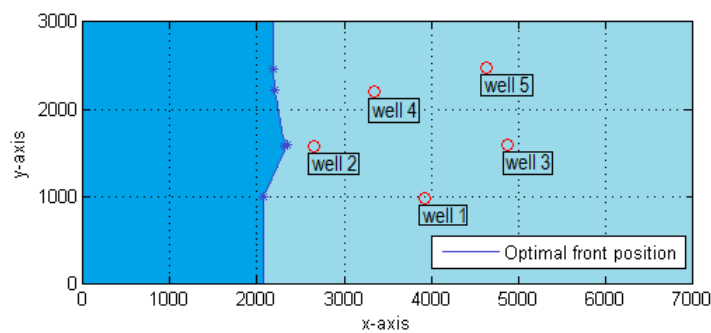
Ανάμεσα στο μεγάλο αριθμό προσομοιώσεων έχουν πραγματοποιηθούν για να δοκιμαστεί η στοχαστική διαδικασία διαχείρισης αντλήσεων που περιγράφεται στις προηγούμενες παραγράφους, στην ενότητα αυτή επιλέχθηκε προς παρουσίαση μία ενδεικτική.

Οι θέσεις των πηγαδιών άντλησης καθώς και τα χαρακτηριστικά του υδροφορέα είναι τα ίδια με εκείνα που περιλαμβάνονται στην εργασία [2]. Έτσι, ο υδροφορέας διαθέτει 5 ενεργές γεωτρήσεις τοποθετημένες στις συντεταγμένες  $(x_1, y_1) = (2657, 1572)$ ,  $(x_2, y_2) = (3353, 2200)$ ,  $(x_3, y_3) = (3932, 975)$ ,  $(x_4, y_4) = (4632, 2470)$  και  $(x_5, y_5) = (4873, 1586)$ , ενώ οι τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται σε αυτήν τη διαδικασία παρουσιάζονται αναλυτικά στον Πίνακα 1 που ακολουθεί.

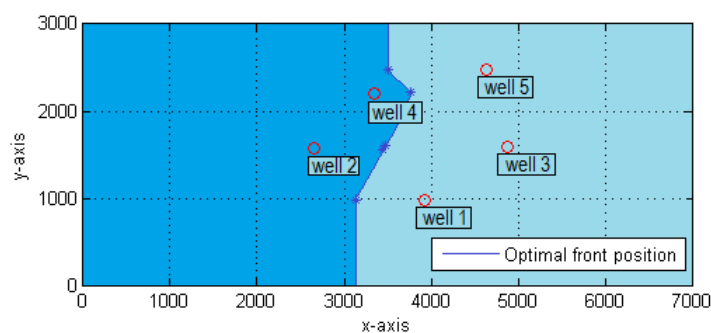
Πίνακας 1: Χαρακτηριστικά υδροφορέα Καλύμνου.

| Χαρακτηριστικά Υπόγειου Υδροφορέα |                 | Χαρακτηριστικά Πηγαδιών Αντλησης                      |
|-----------------------------------|-----------------|-------------------------------------------------------|
| $L = 7000m$                       | $W = 3000m$     | $\bar{Q}_A = 15000m^3/day$                            |
| $K = 100m/day$                    | $N = 30mm/year$ | $\bar{Q}_j = 2500m^3/day, \quad j = 1, \dots, 5$      |
| $q = 1.23m^2/day$                 | $d = 25m$       | $\underline{Q}_j = 200m^3/day, \quad j = 1, \dots, 5$ |

Στο Σχήμα 4, που ακολουθεί, παρουσιάζεται μία τυπική απεικόνιση του μετώπου διεπαφής μεταξύ του αλμυρού και γλυκού νερού στο εσωτερικό του υδροφορέα, ενώ στο Σχήμα 5 το αποτέλεσμα μετά από μικρές διαταραχές στις αντλήσεις αποδεικνύοντας την αστάθεια και ευαισθησία στον υπολογισμό των προτεινόμενων βέλτιστων αντλήσεων.

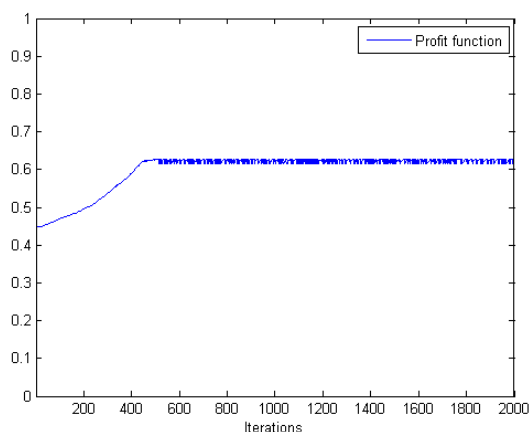
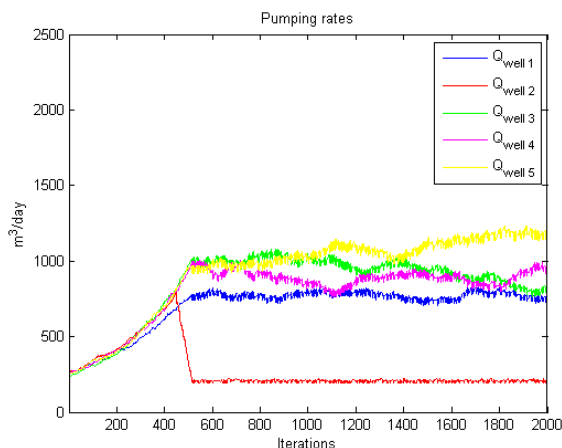


Σχήμα 4: Υφάλμυρο μέτωπο χρησιμοποιώντας τις βέλτιστες αντλήσεις.



Σχήμα 5: Υφάλμυρο μέτωπο χρησιμοποιώντας τις βέλτιστες αντλήσεις.

Στη συνέχεια, στο Σχήμα 6, παρουσιάζουμε γραφικές παραστάσεις απεικόνισης της τυπικής ασυμπτωτικής συμπεριφοράς του ALOPEX σε έναν κύκλο 2000 επαναλήψεων του. Η σύγκλιση του στη βέλτιστη τιμή είναι σχετικά αργή αλλά σταθερή.

(α') Συμπεριφορά της συνάρτησης  $P(Q^{(k)})$ .(β') Τιμές αντλήσεων  $Q_i$ .

Σχήμα 6: Συμπεριφορά του ALOPEX II σε έναν κύκλο 2000 επαναλήψεων.

### 3 Συμπεράσματα

Ο αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX II, φαίνεται ευέλικτος και ικανός να διαχειριστεί ένα σύστημα αντλήσεων, υπό την έννοια να προσφέρει στην τοπική κοινότητα μία ικανοποιητική ποσότητα γλυκού νερού, χωρίς να διακινδυνεύουν οι γεωτρήσεις της περιοχής από το φαινόμενο της υφαλμύρισης. Χρήζει όμως σημαντικών βελτιώσεων ώστε να μπορέσει να ανταποκριθεί αποτελεσματικά. Πρέπει επίσης να διασφαλιστεί ότι το μέτωπο αλμυρού νερού παραμένει σε απόσταση ασφαλείας από όλες τις γεωτρήσεις της περιοχής, ενώ ταυτόχρονα ο ALOPEX σε κάθε του βήμα αυξάνει τις αντλήσεις των γεωτρήσεων, μέχρι το σημείο της μεγιστοποίησής τους, υπό την ισχύ τοπικών φυσικών περιορισμών του υδροφορέα.

### 4 Μελλοντικές Δράσεις

Από τις προσομοιώσεις της τρέχουσας περιόδου προκύπτουν οι εξής στόχοι για το επόμενο διάστημα:

- Κατασκευή νέας συνάρτησης κόστους ικανής να ανταποκρίνεται στους όρους feedback του ALOPEX.
- Ενίσχυση των κριτηρίων βελτιστοποίησης ώστε να δίδεται η δυνατότητα ελέγχου της απόστασης του μετώπου από τα πηγάδια άντλησης.

- Κατασκευή ενός αποτελεσματικού συστήματος *penalty* για τον έλεγχο εξέλιξης της διαδικασίας βελτιστοποίησης ALOPEX.
- Βελτιστοποίηση των παραμέτρων του αλγορίθμου ALOPEX ώστε να επιταχυνθεί η σύγκλισή του.
- Κατασκευή κριτηρίων τερματισμού της διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Όλα να παραπάνω πρέπει επίσης να πλαισιωθούν και από μία ανάλυση ευαισθησίας και ευστάθειας των υπολογισμών μας.

## 5 Παραδοτέα

- Τα αποτελέσματα της παρούσας έρευνας παρουσιάστηκαν στο συνέδριο *NumAn2012 Conference in Numerical Analysis. Recent Approaches to Numerical Analysis. Theory, Methods and Applications*, September 5-8, Ioannina, 2012, υπό τον τίτλο:  
P. Stratis, E. Papadopoulou, Y. Saridakis, *Stochastic optimization in pumping management in coastal aquifers*.
- Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση του Προγράμματος, που αφορά τη Δράση 4.3 για το έτος 2012.

## 6 Συνεργασίες

Η παρούσα εργασία όπως και η δημοσίευσή της που ακολούθησε, είναι προϊόν συνεργασίας των παρακάτω μελών του Πολυτεχνείου Κρήτης:

- Ι. Σαριδάκης, Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Γ. Καρατζάς, Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ε. Παπαδοπούλου, Καθηγήτρια, Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Π. Στρατής, Υποψήφιος Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης



## Αναφορές

- [1] E. Harth, E. Tzanakou, *Alopex: A stochastic method for determining visual receptive fields*, Vision Research, 14, pp.1475, B1482, 1974.
- [2] A. Mantoglou, *Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion*, Water Resources Research, ISSN 0043-397, 39(12), 2003.
- [3] O.D.L. Strack, *Groundwater Mechanics*, Prentice Hall, 1989.
- [4] M. Zakynthinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for a tip-tilt adaptive correcting system*, Comp. Phys. Commun., 150(3) 274, 2003.