Ετήσια Έκθεση Προόδου

Έτος 2013

⊇H∕≻⊖ 🚬

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)



Περιεχόμενα

1	Δρά 1 1	ι ση 1: Συντονισμός Έργου Σκοπός	4 4
	1.2	Δραστηριότητες Έτους 2013	4
2	Δρά ματό 2.1 2.2 2.3 2.4	α ση 2: Αριθμητικές και Αναλυτικές Μέθοδοι για Ασυνεχή Προβλή α Πολλαπλών Πεδίων Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές Στοχαστικές/Ντετερμινιστικές Υβριδικές Μέθοδοι Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά	- 5 5 7 7 8
3	Δρά 3.1 3.2	α ση 3: Υλοποίηση σε Σύγχρονα Υπολογιστικά Περιβάλλοντα Υλοποίηση σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές	9 9 11
4	Δρά 4.1 4.2 4.3	α ση 4: Συγκερασμός και Επικύρωση Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μη- χανικής	11 12 12 14
5	Δρά 5.1	ι ση 6: Διάχυση Αποτελεσμάτων Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια	14 15
Π/	PAP	ТНМАТА	15
A	Ετή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1	16
B′	Ετή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2	46
Γ́	Ετή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3	57
Δ´	Ετή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4	65
Έ	Ετή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1	80
ΣΤ	Έτή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2	106
Z	Ετή	σια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1	119



Έκθεση Προόδου 2013

Η΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2	133
Θ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3	155



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 2013

Κατά τη διάρκεια του έτους 2013, σύμφωνα με το προγραμματισμό του ΤΔΥ, διοργανώθηκαν δύο (2) συναντήσεις των συντονιστών των ΚΕΟ με διοικητικάοικονομικά θέματα καθώς και με θέματα σχετικά με την παρακολούθηση της πορείας εξέλιξης του φυσικού και οικονομικού αντικειμένου, αλλά και τον συντονισμό διμερών ερευνητικών συνεργασιών. Των συναντήσεων αυτών προηγήθηκε (Απρίλιος 2013) συνάντηση του Επιστημονικού Υπευθύνου του έργου με στελέχη της ΕΥΔ στην Αθήνα. Τον Ιούλιο διοργανώθηκε με επιτυχία η ερευνητική συνάντηση όλων των μελών ΚΕΟ καθώς και των εξωτερικών συνεργατών, όπου παρουσιάστηκε αναλυτικά η συνολική ερευνητική δραστηριότητα της προηγούμενης περιόδου και προγραμματίστηκαν μελλοντικές ερευνητικές δράσεις. Ερευνητικές διμερείς συναντήσεις έλαβαν μέρος τον Νοέμβριο του 2013, παράλληλα με τη 2η συνάντηση συντονιστών. Οι πίνακες που ακολουθούν συνοψίζουν τις βασικές δραστηριότητες της δράσης.

ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΟΜΑΔΩΝ			
A/A	ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ
2η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Ιούλιος 2013	18



ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΤΩΝ		
Α/Α ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗ		ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ
1η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Απρίλιος 2013
2η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Νοέμβριος 2013



Από τη διοργάνωση της 2^{ης} Ερευνητικής Συνάντησης στην Αργαλαστή-Βόλου

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:

- Βελτίωση του μαθηματικού φορμαλισμού και γενίκευση της μεθόδου dDHC, ώστε να μπορεί να εφαρμοστεί σε πολλαπλά χωρία με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών (εφαρμογή σε προβλήματα ανάπτυξης πολλαπλών καρκινικών εστιών στον εγκέφαλο). Κατασκευή κατάλληλης αρχικής συνάρτησης που να ικανοποιεί την συνθήκη συνέχειας της λύσης καθώς και την συνθήκη ασυνέχειας της παραγώγου της.
- Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για την επίλυση μη-γραμμικών ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων στις 1 + 1 διαστάσεις όπου ο συντελεστής διάχυσης είναι συνεχής αλλά εξαρτάται γραμμικά από την ίδια τη συνάρτηση.
- Ανάπτυξη της μέθοδου dDHC για την επίλυση γραμμικών ασυνεχών ελλειπτικών και παραβολικών MΔE 2+1 διαστάσεων ορισμένες σε ορθογώνια πεδία και με ασυνέχειες αποκλειστικά στην *x*-κατεύθυνση ή αποκλειστικά *y*-κατεύθυνση (τύπου stripes) ώστε να σχηματιστούν οι εξισώσεις Collocation με χρήση εξωτερικών (tensor) γινομένων των αντίστοιχων μονοδιάστατων εξισώσεων.
- Βελτίωση της παράλληλης επαναληπτικής επίλυσης των εξισώσεων Hermite Collocation σε πολλαπλά γραφικά υποσυστήματα υπολογισμών (GPUs).

Παράλληλα ολοκληρώνεται η συγγραφή και παρουσιάζονται σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια οι εργασίες:

- Ι. Αθανασάκης, Μ.Παπαδομανωλάκη, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model, World Congress of Engineering 2013
- Ι. Αθανασάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490, 012133, 2014



 N. Vilanakis and E. Mathioudakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs II, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, και στη συνέχεια, σε βελτιωμένη έκδοση, δημοσιεύθηκαν στο Journal of Physics: Conference Series 490 012097, 2014.

ενώ αναπτύσσεται λογισμικό σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB και συγγράφονται οι προβλεπόμενες από το ΤΔΥ τεχνικές εκθέσεις.

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).

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

- Περαιτέρω επισκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων.
- Επισκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα.
- Έναρξη των υλοποιήσεων των μεθόδων που θα χρησιμοποιηθούν στην πορεία του έργου.

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων 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 κατατμήσει το αρχικό σύνθετο πρόβλημα MΔE σε ένα σύνολο πλήρως ανεξάρτητων μεταξύ τους υποπροβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων διαφορών) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων των υπο-προβλημάτων. Αισιοδοξούμε ότι θα μπορέσουμε να δημιουργήσουμε ένα γενικό πλαίσιο για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων (και όχι μόνον) αλλά και ένα πρακτικό εργαλείο για την προσομοίωσης τους. Η υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, διότι, πέρα από τον εγγενή παραλληλισμό των στοχαστικών μεθόδων, τα εν λόγω σχήματα έχουν διάφορα επιπρόσθετα ελκυστικά χαρακτηριστικά όσο αφορά την δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα (multithreading, cluster, web services, κ.λ.π.).

Κατά την διάρκεια της αναφερόμενης περιόδου προσπαθήσαμε να αποκτήσουμε μια ξεκάθαρη εικόνα για την σχέση μεταξύ τυχαίων περιπάτων και των γραμμικών ΜΔΕ ιδιαίτερα των ελλειπτικών.

Επικεντρωθήκαμε πρωτίστως στην μελέτη μιας πληθώρας σχετικών εργασιών και στον αρχικό σχεδιασμό και ανάπτυξη των μεθόδων μας. Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων 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 αφορούν στην επέκταση και βελτίωση του μαθηματικού φορμαλισμού της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά για γραμμικές ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης, ώστε η παραγόμενη αναλυτική λύση να συμπεριλάβει τη γενικευμένη περίπτωση των πολλαπλών χωρίων με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών



πηγών.

Ταυτόχρονα την τρέχουσα περίοδο ολοκληρώθηκε και παραδόθηκε η ερευνητική εργασία και η διατριβή:

- Μ. Ασβεστάς, Α. Σηφαλάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous diffusivity, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series 490, 012143, 2014
- Μ. Ασβεστάς, "Εφαρμογή της μεθόδου Φωκά στο μαθηματικό μοντέλο διάχυσης των καρκινικών κυττάρων σε n+1 εγκεφαλικές περιοχές", Μεταπτυχιακή Διατριβή 2013

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 κατανείμει 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 κατανεμημένα 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:

- Εγκατάσταση Εικονικού Cluster σε OpenStack
- Υβριδική παράλληλη υλοποίηση της Monte Carlo σε Cluster πάνω από Cloud
- Συγκριτική μελέτη Μεθόδων Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ / IR) και επιλογή της μεθόδου GEO για υλοποίηση σε παράλληλες αρχιτεκτονικές.
- Υλοποίηση της GEO στην πλατφόρμα FEniCS.

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 Πολυπύρηνα 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 καταλληλόλητα 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 πολυπύρηνα 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 τα ερευνητικά αποτελέσματα περιλαμβάνουν:

- Παρουσίαση αρχικών αποτελεσμάτων εκτέλεσης ενός προγράμματος επίλυσης ΜΔΕ με την χρήση τεχνικών Monte Carlo.
- Παρουσίαση ενός καινοτόμου πλαίσιου το οποίο αυτοματοποιεί την διαχείριση δεδομένων (data management) από ένα σύστημα χρόνου εκτέλεσης (runtime system, RTS) σε ένα ετερογενές επεξεργαστικό σύστημα. Το πλαίσιο αυτό χρησιμοποιεί compile-time ανάλυση βασισμένη στο πολυεδρικό μοντέλο (polyhedral model) με σκοπό να συνδέσει υπολογισμούς με τα δεδομένα που αυτοί οι υπολογισμοί παράγουν και καταναλώνουν.
- 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.

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

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

Τεχνική περιγραφή των ερευνητικών αποτελεσμάτων 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 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 2013) σε



γενικευμένα (με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών) γραμμικά προβλήματα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο στις 1 + 1 αλλά και στις 1 + 2 διαστάσεις όπου παράλληλα επαληθεύσαμε την τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC. Προς τούτο η dDHC μέθοδος συνδυάστηκε με ένα Diagonally Implicit Runge-Kutta σχήμα διακριτοποίησης χρόνου τρίτης τάξεως. Παράλληλα, εφαρμόσαμε τη Hermite-Collocation, με φορμαλισμό Hadamard που αναπτύξαμε στη Δράση 2.1 για μη-γραμμικά παραβολικά προβλήματα σε ομοιογενή περιβάλλοντα, σε γενικευμένα προβλήματα βιολογικής εισβολής τύπου Fisher και KPP. Τα Runge-Kutta σχήματα διακριτοποίησης χρόνου που χρησιμοποιήσαμε για αυτήν την κατηγορία προβλημάτων ανήκουν στην κλάση Strong Stability Preserving (SSP) τριών και τεσσάρων βημάτων τρίτης τάξεως.

Επιπλέον, την περίοδο αυτή συνεχίστηκε η πειραματική επεξεργασία δεδομένων και η πραγματοποίηση ενδεικτικών προσομοιώσεων με την πλατφόρμα πεπερασμένων στοιχείων FEniCS στα υπολογιστικά συστήματα του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ (EEMHY). Ταυτόχρονα επεκτείνεται η μελέτη απεικόνισης μεθόδων Hermite-Collocation σε πολυπυρήνες παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές τύπου CPU/GPU (η περιγραφή των σχετικών αποτελεσμάτων έχει συμπεριληφθεί στη ΤΕ Δράσης 4.3 έτους 2013).

Συνοψίζονται τα παραπάνω, η ερευνητική δραστηριότητα της περιόδου περιλαμβάνει κυρίως:

- Επικύρωση των μεθόδων dDHC, καθώς και μετασχηματισμού Φωκά, και σχημάτων DIRK σε γενικευμένα μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+1 διαστάσεις που περιγράφονται από αντίστοιχα γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.
- Επικύρωση των μεθόδων Hermite-Collocation και SSPRK για μη-γραμμικά ομοιογενή παραβολικά προβλήματα, σε προβλήματα Βιολογικής εισβολής πληθυσμών στις 1 + 1 διαστάσεις.
- Επικύρωση των μεθόδων dDHC και σχημάτων DIRK σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+2 διαστάσεις που περιγράφονται από αντίστοιχα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.

Τα παραδοτέα της περιόδου είναι κοινά με αυτά της παραγράφου 1.2 και έχουν ήδη περιγραφεί.

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 μίας διαδικασίας κυρώσεων ελέγχου η οποία πλαισιώνει τον στοχαστικό αλγόριθμο βελτιστοποίησης ALOPEX ΙΙ. Η μελέτη της συμπεριφοράς της διεξάγεται μέσω του αναλυτικού μοντέλου περιγραφής ορθογώνιων υδροφορέων, το οποίο προσομοιώνει τον υπόγειο υδροφορέα στο Βαθύ Καλύμνου.

Τα παραδοτέα της περιόδου περιγράφονται ως εξής:

- P. Stratis, Y. Saridakis, E. Papadopoulou and M. Zakynthinaki, *ALOPEX* stochastic optimization for pumping management in freshwater coastal aquifers, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, Journal of Physics: Conference Series, 490, 012112, 2014.
- Η Ετήσια Τεχνική Έκθεση του Προγράμματος, που αφορά τη Δράση 4.3 για το έτος 2013.

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	BPABEIA
ICAEM 2013	London Jul 2013	1	1	-
ICPDC 2013	London Jul 2013	1	1	1
ICMSQUARE 2013	Prague Sept 2013	4	4	-



Παράρτημα Α΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 2.1

Υβριδικές/Ασυνεχείς Μέθοδοι Collocation



Περιεχόμενα

1	Σκο	πός	3
	1.1	Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις	3
	1.2	Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβο- λικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις	4
	1.3	Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πε- δίων στις 1 + 2 διαστάσεις	4
	1.4	Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs	4
2	Μεθ	οδολογία	5
	2.1	Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+1$ διαστάσεις \ldots	5
	2.2	Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβο- λικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις	10
	2.3	Επεκτάση της αDHC σε γραμμικά προβληματά πολλάπλων πε- δίων στις $1+2$ διαστάσεις	13
	2.4	Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs 2.4.1 Παράλληλος Αλγόριθμος	16 18
3	Αριθ	θμητικά Αποτελέσματα Υλοποιήσεων	19
	3.1	Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προ- βλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1 + 1$ διαστάσεις	20
	3.2	Αριθμητικά αποτελέσματα της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1+1 διαστάσεις	21
	3.3	Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις	22
	3.4	Αποτελέσματα Παράλληλης επίλυσης των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών GPUs	23
4	Παρ	αδοτέα	24
5	Συν	εργασίες	25
6	Μελ	λοντικές Δράσεις	25



1 Σκοπός

Σκοπός της δράσης 2.1, όπως προκύπτει από το ΤΔΥ, 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).

Στο παραπάνω πλαίσιο, συνεχίζοντας την ερευνητική δραστηριότητα που αναπτύξαμε τη προηγούμενη περίοδο και λαμβάνοντας υπόψιν τον προγραμματισμό του ερευνητικού έργου, οι βασικές ερευνητικές δραστηριότητες που αναπτύξαμε το έτος 2013 επικεντρώθηκαν στην προσαρμογή και επέκταση της μεθόδου Collocation με ασυνεχή κυβικά Hermite στοιχεία (dDHC) ώστε να μπορεί να επιλύει διευρυμένες κλάσεις ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων. Ο σκοπός και οι στόχοι που επετεύχθησαν την τρέχουσα περίοδο εξειδικεύονται και αναλύονται στις παραγράφους που ακολουθούν.

Παράλληλα βελτιώνεται η παράλληλη επαναληπτική επίλυση των εξισώσεων Hermite Collocation σε πολλαπλά γραφικά υποσυστήματα υπολογισμών (GPUs).

1.1 Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

Με κύριο στόχο τη βελτίωση του μαθηματικού φορμαλισμού που αναπτύξαμε την προηγούμενη περίοδο, ώστε με περισσότερη ευκολία να μπορεί να προσαρμόζεται σε γενικότερες κλάσεις προβλημάτων, η μέθοδος dDHC προσαρμόστηκε και επεκτάθηκε σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών. Επίσης, για προβλήματα παραβολικού τύπου όπου απαιτείται και αρχική συνθήκη, κατασκευάστηκε κατάλληλη αρχική συνάρτηση που να ικανοποιεί την συνθήκη της συνέχειας της λύσης καθώς και την συνθήκη της ασυνέχειας της πρώτης παραγώγου της.



1.2 Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1+1 διαστάσεις

Με στόχο την ανάπτυξη του απαραίτητου μαθηματικού φορμαλισμού για την αντιμετώπιση μη-γραμμμικών προβλημάτων πολλαπλών πεδίων αλλά και τη διεύρυνση των φυσικών προβλημάτων και εφαρμογών που μπορούν να επιλυθούν με την νέα μέθοδο dDHC που έχουμε αναπτύξει, την τρέχουσα περίοδο θεωρήσαμε την επίλυση ομογενών μη-γραμμικών ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων στις 1+1 διαστάσεις όπου ο συντελεστής διάχυσης είναι συνεχής αλλά εξαρτάται γραμμικά από την ίδια τη συνάρτηση. Με τη χρήση γινομένων πινάκων τύπου Hadamard αναπτύχθηκε νέος φορμαλισμός για την την αντιμετώπιση των μη γραμμικών όρων πολυωνυμικού τύπου.

1.3 Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις

Έχοντας αναπτύξει τον απαιτούμενο φορμαλισμό στις 1 + 1 διαστάσεις ξεκινάμε την ανάπτυξη φορμαλισμού για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+2 διαστάσεις με στόχο την επέκταση της dDHC μεθόδου για την αντιμετώπιση μιας διευρυμένης κλάσης ρεαλιστικών προβλημάτων. Τα αρχικά μας αποτελέσματα αφορούν ορθογώνιες γεωμετρίες με ασυνέχειες αποκλειστικά στην *x*-κατεύθυνση ή αποκλειστικά *y*-κατεύθυνση (τύπου stripes) ώστε να σχηματιστούν οι εξισώσεις με χρήση εξωτερικού γινομένου.

1.4 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs

Αντικείμενο αυτής της ερευνητικής δραστηριότητας είναι η μελέτη απεικόνισης των Hermite Collocation εξισώσεων, που προκύπτουν από ελλειπτικά προβλήματα συνοριακών τιμών, σε παράλληλες αρχιτεκτονικές που χρησιμοποιούν γραφικούς επιταχυντές GPUs. Σε παλαιότερη εργασίας μας, παρουσιάστηκε παράλληλος αλγόριθμος, στον οποίο γίνεται χρήση του συμπληρώματος Schur σε συνδυασμό με την επαναληπτική μέθοδο επίλυσης Bi-Conjugate Gradient Stabilized (BiCGSTAB) για πολυπύρηνες αρχιτεκτονικές με χρήση γραφικού υποσυστήματος (GPU). Στην ερευνητική διαδικασία, η χρήση του συγκεκριμένου αλγορίθμου επεκτείνεται σε αρχιτεκτονικές υψηλών επιδόσεων με χρήση *πολλαπλών* γραφικών υποσυστημάτων GPUs. Για την υλοποίηση του παράλληλου αλγορίθμου σε συγκεκριμένου τύπου αρχιτεκτονικές, απαιτείται υβριδικού τύπου διαχείριση της μνήμης λόγω της αρχιτεκτονικής των επιμέρους υλικών -



το γραφικό υποσύστημα αποτελεί σύστημα κατανεμημένης μνήμης ενώ οι πολλαπλοί πυρήνες του κεντρικού επεξεργαστή επικοινωνούν μέσω ενιαίας μνήμης. Η υλοποίηση του αλγορίθμου πραγματοποιήθηκε σε πολυπύρηνο μηχάνημα τύπου HP SL390, εξοπλισμένο με γραφικά υποσυστήματα τύπου Tesla M2070, με χρήση των προτύπων OpenMP και OpenACC. Οι χρόνοι εκτέλεσης που παρουσιάζονται φανερώνουν την αποδοτικότητα της παράλληλης εκτέλεσης.

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

2 Μεθοδολογία

2.1 Προσαρμογή της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

Ως γνωστόν, το μοντέλο αναφοράς στις 1+1 διαστάσεις έχει τη μορφή:

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

ή, ισοδύναμα, αντικαθιστώντας $c(x,t) = e^t u(x,t)$, στη μορφή:

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x , x \in [a, b], t \ge 0 \\ u_x(a, t) = 0 \quad \text{Kal} \quad u_x(b, t) = 0 \\ u(x, 0) = f(x) \end{cases}$$
(2)

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει στις Τεχνικές Εκθέσεις των Δράσεων 2.1 & 4.2 έτους 2012, η συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x)$ είναι ασυνεχής και χαρακτηρίζει προβλήματα πολλαπλών πεδίων. Προς χάριν γενίκευσης και βελτίωσης του φορμαλισμού που έχουμε ήδη αναπτύξει, ας υποθέσουμε ότι έχουμε K διακριτά εσωτερικά σημεία διεπαφής w_k στο χωρίο [a, b] που ορίζουν K + 1 διακριτές περιοχές διάχυσης. Δηλαδή υποθέτουμε:

$$a = w_0 < w_1 < \dots < w_k < \dots < w_K < w_{K+1} = b,$$



Τεχνική Έκθεση 2013

και ορίζουμε τα υποχωρία

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) \ , \ k = 1, \dots, K+1 \ .$$
 (3)

έτσι ώστε

$$D(x) = \gamma_k \in \mathbb{R} \text{ for } x \in \mathcal{W}_k, \ k = 1, \dots, K+1$$
 . (4)





Όπως και στο πρόβλημα με τις 3 περιοχές, έτσι και εδώ η παραβολική φύση της διαφορικής συνεπάγεται την συνέχεια της c, καθώς και των c_t , (Dc_x) . Και, καθώς ο D στην (4) είναι ασυνεχής, η c_x πρέπει να είναι επίσης κατάλληλα ασυνεχής, ώστε να προκύπτει η συνέχεια της (Dc_x) . Αυτές οι προυποθέσεις οδηγούν στις παρακάτω συνθήκες μεταξύ των εσωτερικών σημείων διεπαφής w_k , k = 1, ..., K:

$$\begin{cases}
\lim_{x \to w_{k}^{-}} c(x,t) = \lim_{x \to w_{k}^{+}} c(x,t) \\
\lim_{x \to w_{k}^{-}} D(x)c_{x}(x,t) = \lim_{x \to w_{k}^{+}} D(x)c_{x}(x,t)
\end{cases}$$
(5)

Ας θεωρήσουμε τώρα μια ομοιόμορφη διαμέριση σε κάθε ένα απο τα $k = 1, \ldots, K + 1$ κλειστά χωρία $\overline{\mathcal{W}}_k = [w_{k-1}, w_k]$ σε N_k υποδιαστήματα μήκους

$$h_k := \frac{w_k - w_{k-1}}{N_k} \,. \tag{6}$$

οπότε

$$[a,b] = \bigcup_{j=1}^{N+1} I_j , \quad I_j = [x_{j-1}, x_j]$$
(7)

με

$$x_j = a + j h_j(k) , \quad j = 0, \dots, N+1 ,$$
 (8)

όπου

$$N = \sum_{k=1}^{K+1} N_k \text{ and } h_j(k) = h_k \text{ when } I_j \subseteq \overline{\mathcal{W}}_k , \qquad (9)$$

για k = 1, ..., K + 1.



Η μέθοδος DHC (cf. [20], [21], [22]) αναζητά προσεγγίσεις $u(x,t) \thicksim c(x,t)$ στη μορφή

$$u(x,t) = \sum_{j=0}^{N+1} \left[\alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x) + \alpha_{2j+1}(t)\phi_{2j+1}(x) \right]$$
(10)

όπου οι ασυνεχείς συναρτήσεις βάσης Hermite $\phi_{2j}(x)$ και $\phi_{2j+1}(x)$, με κέντρα τον κόμβο x_j , ορίζονται ως εξής

$$\phi_{2j}(x) = \begin{cases} \phi\left(\frac{x_j - x}{h_j(k)}\right) &, x \in I_j \\ \phi\left(\frac{x - x_j}{h_{j+1}(k)}\right) &, x \in I_{j+1} \\ 0 &, \delta i \alpha \phi o \rho \epsilon \tau i \kappa \dot{\alpha} \end{cases},$$
(11)

και

$$\phi_{2j+1}(x) = \begin{cases} -\frac{h_j(k)}{\gamma_j}\psi\left(\frac{x_j-x}{h_j(k)}\right) & , x \in I_j \\ \frac{h_{j+1}(k)}{\gamma_{j+1}}\psi\left(\frac{x-x_j}{h_{j+1}(k)}\right) & , x \in I_{j+1} \\ 0 & , \delta i a \phi o \rho \epsilon \tau i \kappa \dot{\alpha} \end{cases}$$
(12)

Οι συναρτήσεις $\phi(s)$ και $\psi(s)$ είναι τα κυβικά πολυώνυμα Hermite ορισμένα στο [0,1],

$$\phi(s) = (1-s)^2(1+2s) , \ \psi(s) = s(1-s)^2.$$
 (13)

Στο Σχ. 2 παρακάτω, φαίνονται τα ασυνεχή πολυώνυμα Hermite μεταξύ αρκετών κόμβων που περιέχουν και ένα σημείο διεπαφής $x_i = w_k$.

Μπορεί τώρα να επαληθευθεί ότι,

$$u(x_j, t) = a_{2j}(t),$$
 (14)

$$u_x(x_j,t) = \begin{cases} a_{2j+1}(t)/\gamma_j &, & \text{if } x_j \in I_j \bigwedge x_j \neq w_k \ \forall k \\ a_{2j+1}(t)/\gamma_{j+1} &, & \text{if } x_j \in I_{j+1} \bigwedge x_j \neq w_k \ \forall k \end{cases},$$
(15)

οπότε, για οποιοδήποτε $x_j = w_k$, ισχύει

$$\lim_{x \to w_k^-} \gamma_j u_x(x,t) = \lim_{x \to w_k^+} \gamma_{j+1} u_x(x,t)$$
(16)

άρα, οι συνθήκες (5) ικανοποιούνται.

Θεωρώντας τα εσωτερικά σημεία Gauss σε κάθε στοιχείο *I*_{*i*}:

$$\sigma_{2j-1} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} - \frac{h_j}{2\sqrt{3}} \text{ and } \sigma_{2i} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} + \frac{h_j}{2\sqrt{3}}.$$
 (17)





Σχήμα 2: Ασυνεχής βάση Hermite μεταξύ των $x_i = w_k$

Αντικαθιστώντας τώρα, την προσεγγιστική λύση (10) στην διαφορική, και παρατηρώντας ότι κάθε *I_j* είναι στοιχείο με βαθμό ελευθερίας τέσσερα οι elemental εξισώσεις collocation μπορούν να γραφούν ως

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \dot{\alpha}_L(t) \phi_L(\sigma_i) = \gamma_j \sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t) \phi_L''(\sigma_i)$$
(18)

για
$$i=2j-1$$
 , $2j$ και φυσικά, $\dot{\alpha}_L(t)=rac{d}{dt}\alpha_L(t)$ και $\phi_L^{''}(x)=rac{d}{dx}\phi_L(x).$

Δουλεύοντας όπως στη TE 2012, οι elemental εξισώσεις του γραμμικού όρου $u^{(m)}(x,t)$ μπορούν να γραφούν στην εξής μορφή πίνακα:

$$\sum_{L=2j-2}^{2j+1} \alpha_L(t)\phi_L^{(m)}(\sigma_i) = C_j^{(m)} \boldsymbol{\alpha}_j , \ i = 2j-1, 2j ,$$
(19)

όπου

$$C_j^{(m)} = \begin{bmatrix} A_j^{(m)} & B_j^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 2$$
 (20)

$$\boldsymbol{\alpha}_{j} = \begin{bmatrix} \alpha_{2j-2}(t) & \alpha_{2j-1}(t) & \alpha_{2j}(t) & \alpha_{2j+1}(t) \end{bmatrix}^{\mathsf{I}}$$
(21)



με

$$A_{j}^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j-2}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h_{j}^{m}} \begin{bmatrix} s_{1}^{(m)} & \frac{h_{j}(k)}{\gamma_{j}} s_{2}^{(m)} \\ s_{3}^{(m)} & -\frac{h_{j}(k)}{\gamma_{j}} s_{4}^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 2$$

$$B_{j}^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h_{j}^{m}} \begin{bmatrix} s_{3}^{(m)} & \frac{h_{j}(k)}{\gamma_{j}} s_{4}^{(m)} \\ s_{1}^{(m)} & -\frac{h_{j}(k)}{\gamma_{j}} s_{2}^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 2 \quad .$$

$$(23)$$

Επομένως, συνθέτοντας τα παραπάνω, το σύνολο των εξισώσεων μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$C^{(0)}\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \boldsymbol{\gamma} C^{(2)} \boldsymbol{\alpha} \tag{24}$$

όπου οι $(2N+2) \times (2N+2)$ πίνακες $C^{(m)} m = 0, 1, 2$, γ ορίζονται από:

$$C_{m} = \begin{bmatrix} \tilde{A}_{1}^{(m)} & B_{1}^{(m)} & & & \\ & A_{2}^{(m)} & B_{2}^{(m)} & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & A_{N}^{(m)} & B_{N}^{(m)} & \\ & & & & A_{N+1}^{(m)} & \tilde{B}_{N+1}^{(m)} \end{bmatrix}$$
(25)

και

$$\boldsymbol{\gamma} = diag \left[\gamma_1 \ \gamma_2 \ \gamma_2 \ \cdots \ \gamma_N \ \gamma_N \ \gamma_{N+1} \right].$$

Επιπλέον, επιβεβαιώνεται ότι από τις συνοριακές συνθήκες Neumann συνεπάγεται ότι

$$\alpha_1(t) = \alpha_{2N+3}(t) = 0 \quad , \tag{26}$$

και

$$\dot{\alpha}_1(t) = \dot{\alpha}_{2N+3}(t) = 0$$
 . (27)

Τα διανύσματα $\tilde{A}_1^{(k)}$ και $\tilde{B}_{N+1}^{(k)}$ είναι τα ανάλογα των $A_1^{(k)}$ και $B_{N+1}^{(k)}$, παραλείποντας την δεύτερη στήλη λόγω των συνοριακών συνθηκών.



Τέλος, έχουμε προσεγγίσει την αρχική συνθήκη με δύο διαφορετικές συναρτήσεις. Ειδικότερα,ορίσαμε μια συνάρτηση τύπου Dirac για πολλαπλές αρχικές πηγές,

$$f(x) = \sum_{i=1}^{k} \delta(x - \xi_i) \ , \ \xi \in [a, b] \ ,$$
 (28)

και μια συνάρτηση που ικανοποιεί τις συνθήκες ασυνέχειας μεταξύ των διαφορετικών χωρίων,

$$f_k(x) = \begin{cases} \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{\frac{\left[(x + \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} w_i) - \gamma(c + \sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} w_i)\right]^2}{(\alpha\gamma)^2}} &, k \text{ terms for all } \\ \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\left[\gamma(x - c) + (1 - \gamma)\sum_{i=1}^{k-1} (-1)^{i-1} w_i\right]\right]^2}{(\alpha\gamma)^2}} &, k \text{ for all } \end{cases}$$

2.2 Ανάπτυξη της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις

Ένας τρόπος για να ενσωματωθεί η πυκνοεξαρτώμενη κινητικότητα ενός είδους, στην εξίσωση Fisher-Kolmogorov, ένα κλασσικό μοντέλο βιολογικής εισβολής, είναι να αντικατασταθεί ο σταθερός συντελεστής διάχυσης D με έναν πυκνοεξαρτώμενο D(u). Υποθέτωντας ότι η διάχυση εξαρτάται γραμμικά απο την πυκνότητα, δηλαδή $D(u) = \lambda_0 u + \lambda_1$, η γενικευμένη εξίσωση του Fisher μπορεί να πάρει την ακόλουθη μορφή:

$$u_t = \left[(\lambda_0 + \lambda_1 u) u_x \right]_x + \lambda_2 u - \lambda_3 u^2$$
⁽²⁹⁾

όπου $u \equiv u(x,t), x \in [a,b], t \in [0,T]$ και $\lambda_i \in \mathbf{R}$, για i = 0, 1, 2, 3, με $\lambda_2\lambda_3 > 0$, ενώ έχουν τεθεί συνοριακές συνθήκες τύπου Neumann $u_x(a,t) = 0$ και $u_x(b,t) = 0$ καθώς και μια αρχική κατανομή της πυκνότητας u(x,0) = f(x). Υπάρχουσες αναλυτικές λύσεις που έχουν βρεθεί βοηθούν στην μελέτη της συμπεριφοράς των αριθμητικών λύσεων και στο καθορισμό της τάξης σύγκλισης της μεθόδου.

Μία γενικότερη κλάση μη-γραμμικών προβλημάτων περιγράφεται από την Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov (KPP) εξίσωση

$$u_t = \mathcal{L}[u] := [(\lambda_0 + \lambda_1 u) u_x]_x + \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} u^k ,$$
(30)



την οποία και θα χρησιμοποιήσουμε στη παρούσα έκθεση για την παραγωγή του μαθηματικού φορμαλισμού.

Θεωρώντας μια επαρκώς ομαλή λύση της εξίσωσης (30), μια ομοιόμορφη διαμέριση του [a, b] σε N υποδιαστήματα, με βήμα h = (b - a)/N και κόμβους $x_j := a + jh$, j = 1, ..., N + 1, η μέθοδος Hermite Collocation επιδιώκει $O(h^4)$ προσεγγίσεις της μορφής:

$$U(x,t) = \sum_{j=1}^{N+1} \left[\alpha_{2j-1}(t)\phi_{2j-1}(x) + \alpha_{2j}(t)\phi_{2j}(x) \right]$$
(31)

όπου $\phi_{2j-1}(x)$ και $\phi_{2j}(x)$ είναι οι συνεχείς συναρτήσεις βάσης Hermite και ορίζονται φυσικά από τις σχέσεις (11)-(12) με $\gamma_j = 1$ και $h_j(k) = h$ για όλα τα j.

Η αντικατάσταση της προσεγγιστικής λύσης (31) στην εξίσωση (30) παράγει το *υπόλοιπο*:

$$\mathcal{R}(x,t) := U_t - \left[(\lambda_0 U + \lambda_1) U_x \right]_x - \sum_{k=1}^M \lambda_{k+1} U^k \quad .$$
(32)

Χρησιμοποιώντας τώρα τα σημεία Gauss ως εσωτερικά σημεία Collocation μπορούμε να αποδείξουμε οτι οι εξισώσεις Collocation σε κάθε στοιχείο γράφονται στη μορφή:

$$\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \dot{\alpha}_{\ell}(t)\phi_{\ell}(\sigma_{i}) = \left(\lambda_{0} + \lambda_{1}\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_{\ell}(t)\phi_{\ell}(\sigma_{i})\right)$$

$$\cdot \sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_{\ell}(t)\phi_{\ell}''(\sigma_{i})$$

$$+ \lambda_{1} \left(\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_{\ell}(t)\phi_{\ell}'(\sigma_{i})\right)^{2}$$

$$+ \sum_{k=1}^{M} \lambda_{k+1} \left(\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_{\ell}(t)\phi_{\ell}(\sigma_{i})\right)^{k}.$$
(33)

Για να παράξουμε την αντίστοιχη εξίσωση σε μορφή πινάκων, όπως και στην προηγούμενη παράγραφο, θέτουμε

$$\sum_{\ell=2j-1}^{2j+2} \alpha_{\ell}(t) \phi_{\ell}^{(m)}(\sigma_i) |_{i=2j-1,2j} = C_j^{(m)} \boldsymbol{\alpha}_j , \qquad (34)$$

όπου

$$C_{j}^{(m)} = \begin{bmatrix} A_{j}^{(m)} & B_{j}^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, 2$$
(35)

$$\boldsymbol{\alpha}_{j} = \begin{bmatrix} \alpha_{2j-1}(t) & \alpha_{2j}(t) & \alpha_{2j+1}(t) & \alpha_{2j+2}(t) \end{bmatrix}^{\mathsf{T}}$$
(36)



Δ2.1/12

με

$$A_{j}^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j-1}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h^{m}} \begin{cases} \begin{bmatrix} s_{1}^{(m)} & hs_{2}^{(m)} \\ s_{3}^{(m)} & -hs_{4}^{(m)} \end{bmatrix}, m = 0, 2 \quad (37)$$

$$\begin{bmatrix} s_{1}^{(m)} & hs_{2}^{(m)} \\ s_{1}^{(m)} & hs_{4}^{(m)} \end{bmatrix}, m = 1$$

$$B_{j}^{(m)} = \begin{bmatrix} \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) & \phi_{2j+2}^{(m)}(\sigma_{2j-1}) \\ \phi_{2j+1}^{(m)}(\sigma_{2j}) & \phi_{2j+2}^{(m)}(\sigma_{2j}) \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{h^{m}} \begin{cases} \begin{bmatrix} s_{3}^{(m)} & hs_{4}^{(m)} \\ s_{1}^{(m)} & -hs_{2}^{(m)} \end{bmatrix}, m = 0, 2 \quad (38)$$

$$\begin{bmatrix} s_{3}^{(m)} & hs_{4}^{(m)} \\ s_{3}^{(m)} & hs_{4}^{(m)} \\ s_{3}^{(m)} & hs_{4}^{(m)} \end{bmatrix}, m = 1$$

και

	m = 0	m = 1	m = 2
$s_1^{(m)}$	$\frac{9+4\sqrt{3}}{18}$	-1	$-2\sqrt{3}$
$s_2^{(m)}$	$\frac{3+\sqrt{3}}{36}$	$\frac{\sqrt{3}}{6}$	$-1 - \sqrt{3}$
$s_3^{(m)}$	$\frac{9-4\sqrt{3}}{18}$	1	$2\sqrt{3}$
$s_4^{(m)}$	$-\frac{3-\sqrt{3}}{36}$	$-\frac{\sqrt{3}}{6}$	$-1+\sqrt{3}$

Αποδεικνύοντας, επιπλέον, ότι οι Collocation εξισώσεις στοιχείου για έναν γενικό μη-γραμμικό όρο της μορφής

$$u^{(m)}(x,t)u^{(n)}(x,t)$$
, $m,n=0,1,2$

μπορούν να εκφραστούν ως το γινόμενο πινάκων κατά Hadamard

$$\left(C_{j}^{(m)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right)\circ\left(C_{j}^{(n)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right),$$
(39)



οι Collocation εξισώσεις στοιχείου σε μορφή πινάκων παίρνουν τη μορφή:

$$C_{j}^{(0)}\dot{\boldsymbol{\alpha}}_{j} = \lambda_{0}C_{j}^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_{j} + \lambda_{1}\left(C_{j}^{(0)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right) \circ \left(C_{j}^{(2)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right) \\ + \lambda_{1}\left(C_{j}^{(1)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right) \circ \left(C_{j}^{(1)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right) \\ + \sum_{k=1}^{M}\lambda_{k+1}\left(C_{j}^{(0)}\boldsymbol{\alpha}_{j}\right)^{\circ k}.$$

$$(40)$$

Επομένως, συνθέτοντας τα παραπάνω, το σύνολο των εξισώσεων μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$C_{0}\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \lambda_{0}C_{2}\boldsymbol{\alpha} + \lambda_{1} \left(C_{1}\boldsymbol{\alpha} \circ C_{1}\boldsymbol{\alpha} + C_{0}\boldsymbol{\alpha} \circ C_{2}\boldsymbol{\alpha}\right) + \sum_{k=1}^{M} \lambda_{k+1} \left(C_{0}\boldsymbol{\alpha}\right)^{\circ k}$$
(41)

όπου οι $(2N+2) \times (2N+2)$ πίνακες $C_m, m = 0, 1, 2$ έχουν την μορφή (25).

Επισημαίνουμε ότι το Collocation μη-γραμμικό σύστημα ΣΔΕ που ορίζεται στη σχέση (41) μπορεί τώρα να συνδυαστεί με SSP Runge-Kutta σχήματα υψηλής τάξης για επιτευχθεί επιτυχώς η λύση του και να διερευνηθεί και η τάξη σύγκλιση των σχημάτων. Αυτό γίνεται ενδεικτικά στη Παράγραφο 3 καθώς και στη Τεχνική Έκθεση της Δράσης 4.2 όπου και επιβεβαιώνεται η τέταρτη τάξη σύγκλιση της μεθόδου Collocation.

2.3 Επέκταση της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις

Για να αναπτύξουμε τον απαραίτητο φορμαλισμό στις 1+2 διαστάσεις ας θεωρήσουμε κατ' αρχήν το στοιχειώδες γραμμικό μοντέλο Προβλήματος Αρχικών-Συνοριακών Συνθηκών (ΠΑΣΣ) Διάχυσης-Αντίδρασης:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot (D\nabla c) + c \quad , \qquad (x,y) \in [a,b]^2 \; , \; 0 \le t \le T \\ c(0,x,y,) &= f(x,y) \quad , \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \end{aligned}$$

όπου φυσικά c := c(t, x, y,), το οποίο βεβαίως μετά τον κλασικό εκθετικό μετασχηματισμό $c \leftarrow e^t c$ γράφεται ισοδύναμα και ως

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c) \quad , \qquad (x, y) \in [a, b]^2 \ , \ 0 \le t \le T$$

$$c(0, x, y,) = f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0.$$
(42)



Η περίπτωση ενδιαφέροντος, τον φορμαλισμό της οποίας αναπτύξαμε την τρέχουσα περίοδο, χαρακτηρίζεται από το γεγονός ότι ο συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x, y)$ παρουσιάζει ασυνέχειες αποκλειστικά στην *x*-κατεύθυνση ή αποκλειστικά *y*-κατεύθυνση (τύπου stripes). Οι περιπτώσεις αυτές σχηματικά απεικονίζονται στο σχήμα Σχ. (3) για καλλίτερη κατανόηση.



Σχήμα 3: Χωρία Stripes και στις δεύο διευθύνσεις.

Χωρίς να βλάπτεται η γενικότητα, ας υποθέσουμε ότι έχουμε K διαφορετικές γραμμές διεπαφής $x = w_k$, όλες κάθετες στην x διεύθυνση, στο χωρίο $[a, b]^2$ όπου δημιουργούν K + 1 διαφορετικές περιοχές διάχυσης. Πιο συγκεκριμένα, θεωρώντας τη διαμέριση

$$a = w_0 < w_1 < \dots < w_k < \dots < w_K < w_{K+1} = b,$$

και τα αντίστοιχα πεδία

$$\mathcal{W}_k = (w_{k-1}, w_k) \times (a, b) , \quad k = 1, \dots, K+1$$
, (43)

ο συντελεστής διάχυσης $D \equiv D(x, y)$ καθορίζεται από την σχέση

$$D(x,y) = \gamma_k \in \mathbb{R} \text{ yia } (x,y) \in \mathcal{W}_k , \ k = 1, \dots, K+1 .$$
(44)

Παρατηρούμε τώρα, ότι, η παραβολική φύση της διαφορικής συνεπάγεται τη συνέχεια της c, όπως φυσικά στις c_t και (Dc_x) . Αφού ο D (βλ. 44) είναι ασυνεχής στη x κατεύθυνση, η c_x πρέπει να είναι επίσης ασυνεχής, ώστε το γινόμενο (Dc_x) να είναι συνεχής. Σε αυτό το σημείο πρέπει να αναφέρουμε ότι, αφού ο D είναι συνεχής στην y κατεύθυνση τότε η c_y και η Dc_y είναι συνεχείς συναρτήσεις. Αυτές





Σχήμα 4: Ο συντελεστής διάχυσης D για τα K + 1 πεδία για το πρόβλημα τύπου stripes στη *x*-διεύθυνση.

οι συνθήκες ορίζουν τις σχέσεις που πρέπει να ισχύουν στις γραμμές διεπαφής w_k , $k=1,\ldots,K$:

$$\lim_{x \to w_{k}^{-}} c(t, x, y) = \lim_{x \to w_{k}^{+}} c(t, x, y)$$

$$\lim_{x \to w_{k}^{-}} D(x, y)c_{x}(t, x, y) = \lim_{x \to w_{k}^{+}} D(x, y)c_{x}(t, x, y).$$
(45)

Ας θεωρήσουμε τώρα μια ομοιόμορφη διαμέριση σε καθένα απο τα $k=1,\ldots,K+1$ κλειστά χωρία $[w_{k-1},w_k]$ από N_{x_k} υποδιαστήματα μήκους

$$h_{x_k} := \frac{w_k - w_{k-1}}{N_{x_k}} , \qquad (46)$$

και Ν_y υποδιαστήματα μήκους

$$h_y := \frac{b-a}{N_y} \,. \tag{47}$$

Οπότε,

$$[a,b]^{2} = \bigcup_{i=1}^{N_{x_{k}}+1} \bigcup_{j=1}^{N_{y}+1} I_{ij} , \quad I_{ij} = I_{i}^{x} \times I_{j}^{y}$$
(48)

με

$$I_i^x = [x_{i-1}, x_i] , \quad I_j^y = [y_{j-1}, y_j]$$

$$x_i = a + i h_i(k), \quad i = 0, \dots, N+1 ,$$

$$y_j = a + j h_y, \quad j = 0, \dots, N_y + 1 ,$$
(49)

όπου

$$N = \sum_{k=1}^{K+1} N_k \text{ and } h_i(k) = h_{x_k} \text{ when } I_i^x \subseteq [w_{k-1}, w_k] ,$$
 (50)



για k = 1, ..., K + 1.

Η μέθοδος dDHC αναζητά προσεγγίσεις $u(t, x, y) \sim c(t, x, y)$ της μορφής

$$u(t, x, y) = \sum_{i=0}^{2N+1} \sum_{j=0}^{2N_y+1} \alpha_{i,j}(t) \Phi_{i,j}(x, y)$$
(51)

όπου οι derivative discontinuous Hermite bicubic συναρτήσεις βάσης $\Phi_{i,j}(x,y)$ ορίζονται ως

$$\Phi_{i,j}(x,y) = \phi_i(x;\gamma_k)\phi_j(y;1)$$
(52)

με $\phi_i(x; \gamma_k)$ να συμβολίζουν τα ασυνεχή Hermite κυβικά πολυώνυμα, όπως ορίστηκαν στις σχέσεις (11)-(12), και $\phi_j(y; 1)$ να συμβολίζουν τα συνεχή Hermite κυβικά πολυώνυμα, δηλ. όπως ορίστηκαν στις σχέσεις (11)-(12) αλλά με $\gamma_k = 1$. Όπως έχουμε ήδη εξηγήσει αναλυτικά στη μονοδιάστατη περίπτωση, στους όρους u(t, x), $u_x(t, x)$ και $u_{xx}(t, x)$ αντιστοιχούν οι Collocation πίνακες C_0 , C_1 και C_2 αντίστοιχα. Εδώ, χρησιμοποιώντας το συμβολισμό \tilde{C}_m για να συμβολίσουμε τους πίνακες που προέρχονται από τα ασυνεχή Hermite πολυώνυμα στη *x*-κατεύθυνση και C_m για να συμβολίσουμε τους πίνακες που προέρχονται από τα συνεχή ματιστοιχούν τα συνεχή Hermite πολυώνυμα στη *y*-κατεύθυνση, αποδείξαμε (γενικεύοντας τον σχετικό φορμαλισμό του Tensor Product Collocation) ότι μπορούμε να γράψουμε το σύστημα ΣΔΕ που προκύπτει από τη διακριτοποίηση του ΠΑΣΣ (43) στη μορφή:

όπου

$$A_{\tilde{0}0}\dot{\boldsymbol{a}} = A_{\tilde{2}0}\boldsymbol{a} + A_{\tilde{0}2}\boldsymbol{a}$$
$$A_{\tilde{m}n} = \tilde{C}_m \otimes C_n \; .$$

Αξίζει να σημειώσουμε ότι στην περίπτωση όπου οι γραμμές διεπαφής ήταν κάθετες στον άξονα *y'y* τότε είναι εύκολο κανείς να παρατηρήσει ότι το αντίστοιχο σύστημα που θα προκύψει είναι της μορφής:

$$A_{0\tilde{0}}\boldsymbol{\dot{a}} = A_{2\tilde{0}}\boldsymbol{a} + A_{0\tilde{2}}\boldsymbol{a}$$

Δηλαδή οι πίνακες με τα ασυνεχή πολυώνυμα Hermite θα είναι αυτοί που αντιστοιχούν στην *y* διεύθυνση.

2.4 Παράλληλη επαναληπτική επίλυση των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών υποσυστημάτων GPUs

Η μέθοδος διακριτοποίησης Collocation είναι μια γνωστή μέθοδος Πεπερασμένων Στοιχείων υψηλής τάξης ακρίβειας, βασισμένη στα πολυώνυμα Hermite



bi-cubic, που χρησιμοποιείται στην επίλυση ελλειπτικών Προβλημάτων Συνοριακών Τιμών (BVPs) (βλέπε [51, 44, 46]).

Με την εφαρμογή της μεθόδου σε τετράγωνα χωρία, και με χρήση ομοιόμορφης $n_s \times n_s$ διαμέρισης και κατάλληλης αρίθμησης αγνώστων και εξισώσεων με τη μέθοδο red-black ([45]), το παραγόμενο Collocation red-black γραμμικό σύστημα $Ax = \mathbf{b}$ είναι στη μορφή [35],

$$\begin{bmatrix} D_R & H_B \\ H_R & D_B \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_R \\ \boldsymbol{x}_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_R \\ \boldsymbol{b}_B \end{bmatrix}$$
(53)

όπου οι πίνακες D_R και D_B είναι block διαγώνιοι και ομαλοί (βλέπε [49]). Το μεγάλο μέγεθος του γραμμικού συστήματος, ειδικά σε περιπτώσεις πυκνής διακριτοποίησης, αυξάνει τον απαιτούμενο χώρο αποθήκευσης των δεδομένων και ταυτόχρονα, υποδεικνύει τη χρήση επαναληπτικής μεθόδου [42, 50] για την αποδοτική επίλυση σε παράλληλα υπολογιστικά συστήματα [52, 46, 47, 48]. Η προρυθμισμένη επαναληπτική μέθοδος BiCGSTAB ([34]) είναι μια αποδοτική μέθοδος επίλυσης για Collocation) γραμμικά συστήματα (53), σε υψηλών επιδόσεων παράλληλες αρχιτεκτονικές [47, 52, 48]. Στην [53] παρουσιάστηκε ένας νέου τύπου επιλύτης με χρήση του συμπληρώματος Schur για πολυπύρηνες αρχιτεκτονικές με χρήση γραφικού υποσυστήματος (GPU). Στη μέθοδο προσεγγίζονται επαναληπτικά μόνο οι black άγνωστοι και από αυτούς υπολογίζονται άμεσα οι κόκκινοι άγνωστοι. Καθότι βασίζεται στην εφαρμογή τεχνικής προρύθμισης στο γραμμικό σύστημα (53), σε 2 φάσεις, η επαναληπτική διαδικασία του αλγορίθμου για την επίλυση του γραμμικού συστήματος του συμπληρώματος Schur περιλαμβάνει επιλύτη δίχως προρύθμιση. Για το λόγο αυτό επιλέγεται η μέθοδος BiCGSTAB, για τον υπολογισμό των μαύρων αγνώστων. Λαμβάνοντας υπ'όψιν ότι αυτό είναι το πλέον δαπανηρό υπολογιστικά μέρος της διαδικασίας επίλυσης - συγκεκριμένα, οι δύο πολλαπλασιασμοί που εμπλέκουν το συμπλήρωμα του Schur του πίνακα για κάθε επαναληπτικό βήμα της BiCGSTAB - επιλέγουμε ένα σημαντικό μέρος των παράλληλων υπολογισμών για αυτούς τους πολλαπλασιασμούς να πραγματοποιούνται σε γραφικά υποσυστήματα προκειμένου να επιτευχθεί επιτάχυνση της επίλυσης. Για την περίπτωση υλοποίησης του αλγορίθμου σε συστήματα με ένα γραφικό υποσύστημα, έχει ήδη παρουσιαστεί ο αλγόριθμος και το μοντέλο διαχείρισης μνήμης. Σε περίπτωση όμως που υπάρχει δυνατότητα χρήσης περισσοτέρων από ένα γραφικών υποσυστημάτων, είναι επιβεβλημένη μια διαφορετικού τύπου υβριδική διαχείριση της μνήμης, δεδομένου ότι κάθε υποσύστημα αποθηκεύει δεδομένα στην τοπική του μνήμη και επιπλέον, με δεδομένη την ιδιαίτερη δομή των πινάκων H_R και H_B, προκύπτει εξάρτηση δεδομένων σε κάθε πολλαπλασιασμό πίνακα με διάνυσμα. Η επόμενη παράγραφος παρουσιάζει τον υβριδικό αλγόριθμο, που βασίζεται σε ένα κοινής-κατανεμημένης μνήμης μοντέλο, που απαιτείται σε περίπτωση χρήσης πολλαπλών γραφικών υποσυστημάτων (GPUs).



2.4.1 Παράλληλος Αλγόριθμος

Ο παράλληλος αλγόριθμος για αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης στην [53] βασίζεται σε συγκεκριμένη αντιστοίχιση των αγνώστων σε CPU/GPU υπολογιστικά νήματα επιτρέποντας ομοιόμορφη κατανομή υπολογιστικού φόρτου για τους πυρήνες, ελαχιστοποιώντας το κόστος επικοινωνίας μεταξύ νημάτων και κοινής μνήμης και επιπλέον εκμηδενίζοντας το φαινόμενο idle core κατά τη διάρκεια της παράλληλης διαδικασίας.

Ακολουθώντας την ίδια αντιστοίχιση αγνώστων σε περίπτωση N πλήθους διαθέσιμων γραφικών υποσυστημάτων και για άρτιο $k = \frac{n_s}{N}$, οι παράλληλες διαδικασίες πολλαπλασιασμού πίνακα διάνυσμα $t = H_R z$ και $q = H_B s$ πρέπει να χρησιμοποιήσουν GPU και CPU υπολογιστικά νήματα για την αποφυγή πολλαπλών μεταφορών δεδομένων μεταξύ της CPU μνήμης και της αντίστοιχης της GPU. Οι υπολογιστικοί πυρήνες κάθε GPU $j = 1, \ldots, N$ υπολογίζουν τα μέρη των διανυσμάτων t_l και q_l με $l = (j - 1)k + 1, \ldots, jk$ τον αριθμό των υποδιανυσμάτων τι και q_{l} με $l = (j - 1)k + 1, \ldots, jk$ τον αριθμό των υποδιανυσμάτων τις της μέρη των διανυσμάτως t_l και q_l με $l = (j - 1)k + 1, \ldots, jk$ τον αριθμό των υποδιανυσμάτων τις της $t_{(j-1)k+1}, t_{(j-1)k+2}, t_{jk-1}, t_{jk}, q_{(j-1)k+1}$ και q_{jk} απαιτούνται τα υποδιανύσματα $z_{(j-1)k}, z_{jk+1}, s_{(j-1)k-1}, s_{(j-1)k}, s_{jk+1}, s_{(j-1)k+2}, t_{jk-1}, t_{jk}, q_{(j-1)k+1}$ και s_{jk+2} , τα οποία είναι αποθηκευμένα στη τοπική μνήμη των j - 1 και j + 1 GPUs. Για αυτό το λόγο, οι συγκεκριμένες διαδικασίες εκτελούνται από υπολογιστικούς πυρήνες του CPU, όπου επίσης είναι αποθηκευμένα.

Ο παράλληλος αλγόριθμος No 1 (βλέπε Σχήμα 5) υλοποιεί τα προαναφερόμενες διαδικασίες και παρουσιάζει τον $t = H_R z$ GPU/CPU πολλαπλασιασμό πίνακα με διάνυσμα. Ο GPU/CPU πολλαπλασιασμός πίνακα με διάνυσμα

!\$OMP PARALLEL
$k = \frac{n_s}{N}$
call acc_device_num(j,acc_device_nvidia)
!\$ACC KERNELS COPYIN($z((j-1)k+1:jk)$) COPYOUT($t((j-1)k+1:jk)$)
!\$ACC LOOP INDEPENDENT
\underline{do} $l = (j-1)k+1$ \underline{to} jk
Η j GPU υπολογίζει t_l
enddo
!\$ACC END KERNELS
!\$OMP SECTION
Το $j~$ CPU υπολογιστικό νήμα $\underline{uπολογίζει}~t_{(j-1)k+1}$, $t_{(j-1)k+2}$, t_{jk-1} , t_{jk}
!\$OMP END SECTION !\$OMP END PARALLEL

Σχήμα 5: Παράλληλος αλγόριθμος Νο 1.



q = H_Bs μπορεί να περιγραφεί με τον παράλληλο αλγόριθμο No 2 (βλέπε Σχήμα 6). Σημειώνεται ότι, για την αποδοτική υλοποίηση του παραπάνω αλ-

Σχήμα 6: Παράλληλος αλγόριθμος Νο 2.

γορίθμου πρέπει να είναι διαθέσιμα τουλάχιστον N CPU υπολογιστικά νήματα, τα οποία ουσιαστικά διαχειρίζονται τις GPUs. Συγκεκριμένα, κάθε ένα από τα νήματα φορτώνει τα απαραίτητα δεδομένα από τη κοινή μνήμη του CPU και τα μεταφέρει στην αντίστοιχη τοπική μνήμη της GPU. Όταν ολοκληρωθούν όλοι οι υπολογισμοί στη συγκεκριμένη GPU, το ίδιο CPU νήμα μεταφέρει τα δεδομένα από την τοπική μνήμη της GPU στην μνήμη του CPU. Η διαδικασία αυτή περιγράφεται παραπάνω εντός της OMP PARALLEL διαδικασίας. Η υπορουτίνα acc_device_num του προτύπου OpenACC αναλαμβάνει την αντιστοίχιση κάθε GPU σε ένα από τα CPU υπολογιστικά νήματα που έχει εκτελούν μέσα στην OMP parallel region.

3 Αριθμητικά Αποτελέσματα Υλοποιήσεων

Τα αποτελέσματα της μελέτης των μεθόδων που περιγράφονται στην παρούσα Τεχνική Έκθεση, παρουσιάζονται αναλυτικά στην Τεχνική Έκθεση 4.2 Έτος 2013, όσον όμως αφορά τις εξισώσεις Collocation παρουσιάζουμε ένα απλό πρόβλημα όπου επιβεβαιώνεται η τέταρτη τάξη σύγκλισης της dDHC.



3.1 Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

Ανακαλώντας το ΠΑΣΣ (1) θεωρούμε το μοντέλο με τις εξής τιμές το παραμέτρων:

$$a = -5, w_1 = -2.5, w_2 = 0, w_3 = 2.5, b = 5, \gamma = 0.5$$

kai $f(x) = rac{1}{\eta\sqrt{\pi}}e^{-(x-1)^2/\eta^2}$, me $\eta=0.2.$

Για την διακριτοποίηση στο χρόνο χρησιμοποιήθηκαν σχήματα DIRK (βλ. Τε-



Σχήμα 7: Η αριθμητική λύση της εξίσωσης.



Σχήμα 8: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων.

χνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2013) και η τάξη σύγκλισης της Collocation σε όλες τις περιπτώσεις διατηρείται τετάρτη.


3.2 Αριθμητικά αποτελέσματα της μεθόδου Hermite Collocation για ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1+1 διαστάσεις

Το πρόβλημα μοντέλο που χρησιμοποιούμε έχει τη μορφή:

$$u_t = \left[\left(\frac{1}{10}u + 1 \right) u_x \right]_x + u - u^2 - 2u^3$$
$$u_x(-5,t) = 0, \quad u_x(5,t) = 0, \quad u(x,0) = \frac{1}{0.4\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{0.4}\right)^2}.$$

Τα αριθμητικά αποτελέσματα συνοψίζονται στο σχήμα Σχ.?? και στον Πίνακα ΙΙΙ που ακολουθούν.



Σχήμα 9: Απεικόνιση της αριθμητικής λύσης

	Error Norm	Collocation's	Time (sec) needed	
	\mathcal{E}_{∞}	0.o.C.	to reach $t = 2$	
h	SSP(4,3)/(3,3)	SSP(4,3)/(3,3)	SSP(4,3)	SSP(3,3)
1/4	1.72e-05	-	0.18	0.27
1/8	1.26e-06	3.77	0.78	1.20
1/16	8.17e-08	3.94	3.93	6.17
1/32	5.15e-09	3.98	23.03	36.14
1/64	3.24e-10	3.98	147.29	252.05

TABLE III Computational Performance of HC-RK schemes

Για την διακριτοποίηση στο χρόνο χρησιμοποιήθηκαν σχήματα SSPRK (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2013) και η τάξη σύγκλισης της Collocation σε όλες τις περιπτώσεις διατηρείται τετάρτη.



3.3 Αριθμητικά αποτελέσματα της dDHC σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις

Θεωρούμε την εξίσωση

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot [D\nabla(c)] + c \quad , \quad c := c(x, y, t) \\ (x, y) &\in [a, b]^2 \quad , \quad 0 \le t \le 2 \\ c(x, y, 0) &= f(x, y) \quad , \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \end{aligned}$$

όπου

$$D = \begin{cases} 0.2 &, (x, y) \in [-4, -2] \times [-4, 4] \\ 1 &, (x, y) \in (-2, 2) \times (-2, 2) \\ 0.2 &, (x, y) \in [2, 4] \times [-4, 4] \end{cases}$$

Όπως μπορεί κανείς εύκολα να παρατηρήσει στο Σχ. 10, διακρίνονται οι διαφορετικές περιοχές στο χωρίο όπου στις γραμμές διεπαφής σχηματίζεται η ασυνεχής πρώτη παράγωγος της λύσης. Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει στο τέσσερα (Σχ. 11) ενώ ο υπολογιστικός χρόνος επίλυσης της εξίσωσης αυξάνει πολυωνυμικά.



Σχήμα 10: Αριθμητική Λύση του προβλήματος τύπου Stripes σε 2+1 διαστάσεις





Σχήμα 11: Τάξη Σύγκλισης

3.4 Αποτελέσματα Παράλληλης επίλυσης των Collocation εξισώσεων με χρήση πολλαπλών GPUs

Το κοινής μνήμης υπολογιστικό μηχάνημα HP SL390s G7 διαθέτει ένα 6πύρηνο επεξεργαστή τύπου Xeon X5660@2.8GHz με 12 MB Level 3 μνήμη ταχείας προσπέλασης. Η συνολική μνήμη είναι 24 GB και το λειτουργικό σύστημα είναι Oracle Linux έκδοσης 6.2. Διαθέτει επίσης 2 γραφικά υποσυστήματα Tesla M2070 αρχιτεκτονικής Fermi ([37]), συνδεδεμένα μέσω PCI-e gen2 θυρών. Κάθε γραφικό υποσύστημα διαθέτει 6 GB μνήμης και 448 πυρήνες, ομαδοποιημένους σε 14 πολυεπεξεργαστές. Η εφαρμογή έχει υλοποιηθεί σε κώδικα Fortran διπλής ακρίβειας με χρήση των προτύπων OpenMP ([43, 40]) και OpenACC ([41]) με μεταγλωτιστή της εταιρείας PGI ([38]), έκδοσης 12.9. Επίσης, για τη πράξεις γραμμικής άλγεβρας χρησιμοποιούνται υποπρογράμματα από τις επιστημονικές βιβλιοθήκες BLAS και LAPACK ([39]).

Για την εκτέλεση του παραπάνω αλγορίθμου χρησιμοποιείται το πρόβλημα Dirichlet modified Helmholtz, το οποίο δέχεται την παρακάτω αναλυτική λύση

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

με τιμή της παραμέτρου $\lambda = 1$. Για τη διερεύνηση της απόδοσης του αλγορίθμου γίνεται χρήση ενός CPU υπολογιστικού νήματος σε περίπτωση εκτέλεσης αποκλειστικά στο CPU, ενώ για CPU/GPU υλοποιήσεις το πλήθος των CPU νημάτων είναι ίσο με το πλήθος των διαθέσιμων GPUs. Επιλύονται διάφορα προβλήματα μεγέθους από $n_s = 256$ μέχρι έως και 2048 πεπερασμένα στοιχεία σε κάθε χωρική κατεύθυνση. Το σύνολο των βαθμών ελευθερίας για κάθε πρόβλημα είναι 16 n_s^2 , καθώς κάθε πεπερασμένο στοιχείο Hermite Collocation έχει 16 βαθμούς ελευθερίας. Για παράδειγμα, στη περίπτωση της πλέον πυκνής διακριτοποίησης, το σύνολο των βαθμών ελευθερίας ξεπερνά τα 67 εκατομμύρια.



Ο πίνακας 1 παρουσιάζει το συνολικό χρόνο υπολογισμών σε secs και τις μετρήσεις της επιτάχυνσης (speedup) με χρήση μόνο CPU αρχικά, CPU και μιας GPU στη συνέχεια και CPU με δύο GPUs τελικά, για όλα τα μεγέθη προβλημάτων.

n_s	CPU	CPU CPU + GPU CPU		CPU +	2GPUs		
	time	time	speedup	time	speedup		
256	12.24	11.18	1.09	8.58	1.42		
512	88.83	71.25	1.25	54.61	1.63		
1024	750.35	549.82	1.37	399.42	1.88		
2048	9176.02	6770.11	1.36	5209.01	1.76		

Πίνακας 1: Speedup και χρόνοι εκτέλεσης σε seconds.

Όπως αναμενόταν, το μέγεθος του προβλήματος και το πλήθος των διαθέσιμων γραφικών υποσυστημάτων επηρεάζουν την απόδοση του αλγορίθμου. Για περιπτώσεις πυκνής διακριτοποίησης παρατηρείται επιτάχυνση της διαδικασίας επίλυσης κατά 50% χρησιμοποιώντας το σύνολο των διαθέσιμων GPU πυρήνων.

4 Παραδοτέα

- IE Athanasakis, MG Papadomanolaki, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013, Vol I, pp 241-246, WCE-ICAEM 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K.
- EN Mathioudakis, ND Vilanakis, EP Papadopoulou and YG Saridakis, Parallel Iterative Solution of the Hermite Collocation Equations on GPUs, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol II, WCE 2013, July 3 - 5, 2013, London, U.K. (Best Paper Award)
- N. Vilanakis and E. Mathioudakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs II, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013, και στη συνέχεια, σε βελτιωμένη έκδοση, δημοσιεύθηκαν στο Journal of Physics: Conference Series 490 012097, 2014.
- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB, Fortran, CUDA.
- 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, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ως σκοπό την ολοκλήρωση του συνολικού στόχου του προγράμματος, προγραμματίζονται ως μελλοντικές δράσεις της ομάδας τα παρακάτω:

- Επέκταση της dDHC σε μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 διαστάσεις
- Επέκταση της dDHC σε μη-γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+2 διαστάσεις τύπου stripes
- Μελέτη dDHC σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+2διαστάσεις με γενικότερη γεωμετρία

Αναφορές

- [1] Akrivis G *Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations*, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012
- [2] R. Alexander "Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE's", *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.
- [3] C. de Boor and B. Swartz "Collocation at Gaussian points", *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.
- [4] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a threedimensional mathematical model of gliomas", *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*, vol.56, no. 6, pp.704-713, 1997.
- [5] J.C. Butcher "Implicit Runge-Kutta processes", *Math.Comp.*, vol.18, pp.50-64, 1964.
- [6] J.C.Butcher "The numerical analysis of ordinary differential equations ," *John Wiley* , 1987.



- [7] Cherniha R and Dutka V *Exact and Numerical Solutions of the Generalized Fisher Equation*, Reports on Mathematical Physics, **47**, 393-412, 2001
- [8] M. Crouzeix "Sur l'approximation des equations differentielles operationnelles lineaires par desmethodes de Runge Kutta", *PhD Thesis*, University Paris VI, Paris, 1975.
- [9] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. "The modeling of diffusive tumours," *Journal of Biological Systems*, vol.3, pp.937-945, 1995.
- [10] de Boor C and Swartz B Collocation at Gaussian points, SIAM Num. Anal., vol. 10, pp. 582-606, 1973
- [11] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006
- [12] Fisher RA The wave of advance of advantageous genes, Ann. Eugen., 7, 255-369, 1937
- [13] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001
- [14] Gottlieb S and Shu CW Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, Mat. Comp., 67, 73-85, 1998
- [15] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., 1(6), 1-25, 1937
- [16] Hairer E Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations, Numer. Math., 35, 57-68, 1980
- [17] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989
- [18] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [19] Murray JD Mathematical Biology, Springer, Berlin, 1989
- [20] M.G. Papadomanolaki and Y.G. Saridakis "Hermite-Collocation for one dimensional tumour invasion model with heterogeneous diffusion," *HERMIS*- $\mu\pi$, vol. 11, pp.63-68, 2010.



- [21] M.G. Papadomanolaki and Y.G. Saridakis "Collocation with discontinous 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.
- [22] 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)
- [23] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010
- [24] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002
- [25] Schmitt B Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations, BIT, **28**, 884-897, 1988
- [26] Shu CW Total-variation-diminishing time discretizations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9, 1073-1084, 1988
- [27] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988
- [28] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.
- [29] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [30] 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.
- [31] 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.
- [32] 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.



- [33] 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.
- [34] H. der Vorst, Bi-CGSTAB, A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci.Stat.Comp., 13: 631-644, 1992.
- [35] R. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, New York: Springer Verlag, 2000.
- [36] Chandra Rohit, Parallel programming with OpenMP, M.K., 2001.
- [37] http://www.nvidia.com/object/tesla-servers.html.
- [38] http://www.pgroup.com.
- [39] http://www.netlib.org.
- [40] http://www.openmp.org.
- [41] http://www.openacc.org.
- [42] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems, SIAM, 2003.
- [43] J. Dongarra and I. Duff and D. Sorensen and H. van der Vorst, *Numerical Linear Algebra for high-performance computers*, SIAM, 1998.
- [44] C.E. Houstis, E.N. Houstis, and J. Rice, *Pde computations: Methods and performance evaluation*, Par. Comp., 5: 141-163, 1997.
- [45] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Iterative solution of elliptic collocation systems on a cognitive parallel computer*, Computers and Maths with Appl., 48: 951-970, 2004.
- [46] E.N. Marhioudakis, E. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Mapping parallel iterative algorithms for pde computations on a distributed memory computers*, Parallel Algorithms and Applications, 8: 141-154, 1996.
- [47] E.N. Marhioudakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Bi-CGSTAB for collocation equations on distributed memory parallel computers*, Numerical Mathematics and advanced applications ENUMATH 2001, Springer, 957-966, 2003.
- [48] E. Mathioudakis and E. Papadopoulou, *Grid computing for the bi-cgstab applied to the solution of the modified helmholtz equation*, Int. J. App. Maths and comp. sciences, (4) 3: 179-184, 2007.



- [49] T. Papatheodorou, *Block aor iteration for nonsymmetric matrices*, Math. Comp., (41) 164: 511-525, 1983.
- [50] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Preconditioning for solving hermite collocation by the bi-cgstab*, WSEAS Trans. on Mathematics, (5) 7: 811-816, 2006.
- [51] C.C.Christara, *Parallel solvers for spline collocation equations*, Advances in Engineering Software, 27: 71-89, 1996.
- [52] S.H.Brill and G.F.Pinder, Parallel implementation of the bi-cgstab method with block red-black gauss-seidel preconditioner applied to the hermite collocation discretization of partial differential equations, Parallel Computing, 28: 399-414, 2002.
- [53] E. Mathioudakis, N. Vilanakis, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, Parallel iterative solution of the Hermite Collocation equations on GPUs, Proc. of the World Congress on Engeneering 2013 (WCE2013, Imperial College -London, U.K.), Best Paper Award of The 2013 International Conference of Parallel and Distributed Computing, 2: 1281-1286, 2013.



Παράρτημα Β΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 2.2

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές



Περιεχόμενα

1	1 Σκοπός			
2	Μεθ 2.1 2.2	οδολογία Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα	3 3 5	
3	Απο 3.1	τελέσματα Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για σύνθετα προβλήματα πολ- λαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων	7 7	
4	Παραδοτέα		8	
5	Συνε	εργασίες	9	
6	Μελ	λοντικές Δράσεις	9	



1 Σκοπός

Στη Δράση 2.2 (*Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ*) κύριο σκοπό αποτελεί 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. Συγκεκριμένα, η δράση το 2013 υλοποιεί τους εξής επιμέρους στόχους: (i) περαιτέρω επισκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων, (ii) επισκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα. (iii) έναρξη των υλοποιήσεων των μεθόδων που θα χρησιμοποιηθούν στην πορεία του έργου.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα αποτελέσματα.

2 Μεθοδολογία

2.1 Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων

Ανακεφαλαιώνοντας τη μέχρι τώρα πορεία του έργου αναφέρουμε ότι τα προβλήματα πολλαπλών φυσικών και χωρίων ορίζονται μέσα από αλγεβρικές μορφές, πριν διακριτοποιηθούν για να επιλυθούν με οποιαδήποτε κατάλληλη μέθοδο. Οι δύο πιο συνήθεις [1] αλγεβρικές μορφές είναι: (i) το συζευγμένο πρόβλημα ισορροπίας (coupled equilibrium problem - (1))

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

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

$$\partial_t u_1 = f_1(u_1, u_2)$$

 $\partial_t u_2 = f_2(u_1, u_2)$ (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	Για k=1,2, (εως 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 δu				
$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$	$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$	$J(u^k)\delta u = -F(u^k)$				
$F_2(u_1^{\bar{k}}, u_2^{\bar{k}+\bar{1}}) = 0$	$F_2(u_1^{\bar{k}+1}, u_2^{\bar{k}+1}) = 0$	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 γειτονικό χωρίο u_2^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 k. Το συγκεκριμένο σχήμα είναι πλήρως παραλληλίσιμο, 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 $u_1^{k+1}, u_2^{k+1}, \ldots, u_{i-1}^{k+1}$ από την τρέχουσα επανάληψη και τις u_{i+1}^k, \ldots, 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 $\frac{\partial F_{i,i}}{\partial u_j}$ στον Ιακωβιανό πίνακα του συστήματος και χρησιμοποιούνται τόσο σε προβλήματα ισορροπίας όσο και σε προβλήματα εξέλιξης.

 $\label{eq:product} \begin{array}{|c|c|c|c|}\hline \mbox{Orighos archives arcsine of the matrix} & \hline \mbox{Orighos arc arcsine of the matrix} & \hline \mbox{Orighos arcsine of the m$

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 [2]–[8] είναι μέθοδοι που χρησιμοποιήθηκαν αρχικά για να αντιμετωπίσουν τέτοιου είδους προβλήματα. Το κύριο χαρακτηριστικό τους είναι ότι διακριτοποιείται το αρχικό 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) [9] αποτελούν μια εναλλακτική μεθοδολογία για την αντιμετώπιση σύνθετων προβλημάτων και περιγράφονται στην παράγραφο 2.2

2.2 Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα

Οι ΜΧΔ μελετούν σύνθετα προβλήματα ΜΔΕ πολλαπλών μοντέλων φυσικής και πολλαπλών χωρίων με κύριο χαρακτηριστικό τα επιμέρους προβλήματα να ορίζονται σε ένα απλό χωρίο στο οποίο εφαρμόζεται μια ΜΔΕ. Επίσης, μελετούν το σύνθετο πρόβλημα, ερμηνεύοντας τη φυσική του προκειμένου να κατανοήσουμε και να αξιοποιήσουμε όλες τις ιδιότητές του. Το επιμέρους προβλήματα που προκύπτουν, προέρχονται από τεμαχισμό είτε με βάση τη φυσική του αρχικού προβλήματος είτε με βάση θέματα παραλληλισμού. Αυτά τα μικρά προβλήματα μελετώνται ανεξάρτητα και επιλύονται με τις κατάλληλες μεθόδους (FEM, FD, κλπ.). Ωστόσο, υπάρχει σύζευξη μεταξύ των υποπροβλημάτων [10]–[12] στα κοινά σύνορα, που ονομάζονται διεπαφές (interfaces), έτσι ώστε να ικανοποιούνται συνθήκες και ιδιότητες του αρχικού προβλήματος (π.χ., συνέχεια και ομαλότητα της λύσης του αρχικού σύνθετου προβλήματος, ή ασυνέχεια στην παράγωγο της λύσης στο αρχικό πρόβλημα κλπ.).

Αρχικές συνθήκες ορίζονται πάνω στις διεπαφές και μεταφέρονται κατάλληλα ως συνοριακές συνθήκες στα επιμέρους προβλήματα. Αυτά επιλύονται ταυτόχρονα και οι προσεγγίσεις που προκύπτουν συνδυάζονται κατάλληλα μέσω κάποιας ΜΧΔ χρησιμοποιώντας την τιμή της λύσης ή/και της παραγώγου της πάνω στις διεπαφές για να παραχθούν καλύτερες προσεγγίσεις (πάνω στις διεπαφές). Κατά την ανάλυση των ΜΧΔ, μελετώνται θέματα μαθηματικής ανάλυσης,



υπολογιστικής πολυπλοκότητας και θέματα υλοποίησης που έχουν να κάνουν με λογισμικό ή/και υλικό [1]. Η μαθηματική ανάλυση επιτυγχάνεται κυρίως σε απλά μοντέλα φυσικής καθώς δεν είναι εφικτό να αναλυθούν σε βάθος πραγματικά προβλήματα. Η χρήση υπάρχοντος λογισμικού είναι μεγάλης σημασίας στην υλοποίηση των ΜΧΔ. Υπάρχει πληθώρα πακέτων λογισμικού που υλοποιούν μεθόδους επίλυσης απλών προβλημάτων αλλά πρέπει να συνδυαστούν και υποστηριχθούν κατάλληλα σε επίπεδο λογισμικού αλλά και υλικού, για να επιλύσουμε σύνθετα προβλήματα

Η διαδικασία των ΜΧΔ είναι επαναληπτική [11] και περιγράφεται ως:

- Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν συνοριακές συνθήκες.
- Επίλυση του κάθε απλού προβλήματος ΜΔΕ, ταυτόχρονα σε όλα τα υποχωρία με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες.
- Σύγκριση των νέων τιμών (με τις προηγούμενες) πάνω στις διεπαφές. Υπολογισμός νέων βελτιωμένων τιμών χρησιμοποιώντας κατάλληλη ΜΧΔ.
- 4. Επιστροφή στο Βήμα 2, μέχρι να επιτευχθεί σύγκλιση.

Η διαδικασία χαλάρωσης στη διεπαφή ποικίλει από απλό μέσο όρο τιμών της συνάρτησης από τα δυο υποχωρία που έχουν κοινό σύνορο τη διεπαφή, μέχρι την εφαρμογή πολύπλοκων τελεστών υψηλής τάξης ακρίβειας με κύριο σκοπό η λύση στο σύνθετο πρόβλημα να ικανοποιεί όλες τις απαραίτητες συνθήκες. Το παραπάνω επαναληπτικό σχήμα, ορίζεται σε επίπεδο φυσικής των προβλημά-των, επομένως η ανάλυση των μεθόδων απαιτεί γνώσεις μαθηματικής ανάλυσης και όχι αριθμητικής ανάλυσης [10], [12]. Τα κύρια πλεονεκτήματα της μεθόδου συνοψίζονται στα εξής: i) παρέχει την ακριβή σύζευξη των διαφόρων μοντέλων τόσο για τις ΜΔΕ όσο και για τις διεπαφές, ii) υποστηρίζει την επαναχρησιμοποίηση του λογισμικού που επιλύουν απλά μοντέλα φυσικής, iii) εισαγάγει ένα υψηλότερο επίπεδο παραλληλισμού στους υπολογισμούς, iv) ακολουθεί τη γεωμετρική και φυσική μοντελοποίηση ενός σύνθετου προβλήματος ΜΔΕ.

Ακολουθεί η μεθοδολογία της χαλάρωσης στη διεπαφή, για προβλήματα που προσομοιώνονται από δεύτερης τάξης ελλειπτικές ΜΔΕ. Τα επιμέρους προβλήματα ΜΔΕ δηλώνονται ως

$$L_i u_i = f_i \quad \text{oto} \quad \Omega_i \quad \text{yia} \quad i = 1, \dots, p,$$
(3)

υποθέτοντας ότι τα Ω_i δεν αλληλοεπικαλύπτονται. Επίσης οι συνθήκες στις διεπαφές μπορούν να περιγραφούν μέσω έμμεσων σχημάτων/τύπων, όπως:

$$G_{i,j}\left(u_i, \frac{\partial u_i}{\partial m_{i,j}}; u_j, \frac{\partial u_j}{\partial m_{i,j}}; J_1, J_2\right) = 0 \quad \text{oto} \quad \Gamma_{i,j} \equiv \Omega_i \bigcap \Omega_j,$$
(4)



όπου $\eta_{i,j}$ το διάνυσμα με κατεύθυνση κάθετη στην διεπαφή $\Gamma_{i,j}$ και J_1, J_2 οι ποσότητες που δηλώνουν τις ασυνέχειες μέσω πηδήματος στην u ή/και την παράγωγό της. Το $G_{i,j}$ δηλώνει τον τελεστή που θα εφαρμοστεί στις u ή/και στις παραγώγους τους πάνω στην διεπαφή. Επίσης, υποθέτουμε την ύπαρξη συνοριακών συνθηκών στα σύνορα των χωρίων (που είναι υποσύνολα των συνόρων του γενικού χωρίου) αλλά και την ύπαρξη λύσης του κάθε επιμέρους προβλήματος ΜΔΕ.

Στις εργασίες [9]–[12] παρουσιάζονται κάποιες ΜΧΔ για ελλειπτικά προβλήματα. Από αυτές τις μεθόδους μελετήσαμε τη GEO και τη ROB. Ενδεικτικά αναφέρουμε ότι η GEO θέτει πάνω στην διεπαφή των χωρίων Ω_i και Ω_j την τύπου Dirichlet συνθήκη :

$$U_i^{New} = U_j^{New} = \frac{U_i^{Old} + U_j^{Old}}{2} - \rho_{ij} \left(\frac{\vartheta U_i^{Old}}{\vartheta \eta} - \frac{\vartheta U_j^{Old}}{\vartheta \eta}\right)$$

Η ROB πάνω στη διεπαφή που ορίζεται από τα χωρία Ω_i και Ω_j θέτει τις μεικτές συνθήκες

$$\frac{\vartheta U_i^{New}}{\vartheta \eta} + \lambda_{ij} * U_i^{New} = \frac{\vartheta U_j^{Old}}{\vartheta \eta} + \lambda_{ij} * U_j^{Old}$$

3 Αποτελέσματα

3.1 Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή για σύνθετα προβλήματα πολλαπλών φυσικών μοντέλων και πολλαπλών χωρίων

Για να οργανώσουμε την συγκέντρωση των πειραματικών αποτελεσμάτων μας καθορίσαμε σετ από προβλήματα ώστε να είναι εφικτή η επαλήθευση της ορθότητας των υλοποιήσεων σε διαφορετικά υπολογιστικά περιβάλλοντα αλλά και της ορθής εφαρμογής ων μεθόδων (GEO, ROB). Ορίσαμε λοιπόν το παρακάτω πρόβλημα ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων με 2 διαφορετικά χωρία που εμφανίζονται στο Σχήμα 1.

$$Lu(x,y) \equiv -\nabla u(x,y) + \gamma^{2}u(x,y) = f(x,y), \quad (x,y) \in \Omega$$
$$u(x,y) = u^{b}(x,y), \quad (x,y) \in \partial\Omega$$

όπου f(x, y) and $u^b(x, y)$ τέτοια ώστε η λύση του προβλήματος να είναι η:

$$u(x,y) = e^{y(x+4)}x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5)$$
(5)

Οι διεπαφές για το ομοιόμορφα (ως προς τον άξονα των x) τεμαχισμένο χωρίο βρίσκονται στις ευθείες $x = x_1 = \frac{1}{3}$ και $x = x_2 = \frac{2}{3}$ και για το μη ομοιόμορφα τεμανισμένο γωρίο στις $x = x_1 = \frac{1}{2}$ και $x = x_2 = \frac{1}{2}$ ενώ $\gamma^2 = 2$.





Σχήμα 1: Ομοιόμορφα (ως προς τον άξονα των x) τεμαχισμένο χωρίο (αριστερά) και Μη Ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο (δεξιά)

		Ομοιόμορφο πρόβλημα			Μη-Ομοιόμορφο πρόβλημα		
case	h	left	middle	right	left	middle	right
c1	0.1	4x21	4x6	4x11	3x21	4x6	6x11
c2	0.05	8x41	8x11	8x21	5x41	7x11	11x21
c3	0.025	14x81	14x21	14x41	9x81	13x21	21x41
c4	0.0125	28x161	28x41	28x81	17x161	25x41	41x81
c5	0.00625	55x321	55x81	55x161	33x321	49x81	81x161
c6	0.003125	108x641	108x161	108x321	65x641	97x161	161x321
c7	0.0015625	214x1281	214x321	214x641	129x1281	193x321	321x641

Πίνακας 3: Περιπτώσεις που εξετάσθηκαν με διαφορετικά βήματα διακριτοποίησης και μεγέθη πλέγματος των χωρίων για τα 3 χωρία των 2 προβλημάτων.

Επίσης, ορίσαμε μια σειρά από διακριτοποιήσεις των υποχωρίων (Πίνακας 3) για τα δυο προβλήματα προκειμένου να ελέγξουμε την σύγκλιση των μεθόδων.

Η υλοποίηση έγινε σε Matlab για πρωτοτυποποίηση και επαλήθευση των μεθόδων ΧΔ και πήραμε αποτελέσματα που επιβεβαίωναν την θεωρητική σύγκλιση στη λύση του αρχικού προβλήματος. Ωστόσο, για πολλούς λόγους στα επόμενα βήματα της Δράσης που θα αφορούν στην επαλήθευση των ΜΧΔ θα μεταφέρουμε τις εργασίες μας στο FEniCS. Το βασικό μειονέκτημα του Matlab είναι ότι χειρίζεται προβλήματα ΜΔΕ το πολύ 2 διαστάσεων, ενώ τα προβλήματα από τις εφαρμογές του έργου (πρόβλημα Ιατρικής και πρόβλημα υφαλμύρισης) είναι προβλήματα τριών διαστάσεων. Επιπλέον η χρήση λογισμικού open source στο έργο θεωρήθηκε μεγάλης σημασίας και όλες οι ομάδες αποφάσισαν από κοινού στην χρήση του FEniCS για την αντιμετώπιση των προβλημάτων ΜΔΕ.

4 Παραδοτέα

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



	KEO 1	KEO 2	KEO 3
Σχεδιασμός ΜΧΔ στο FEniCS		Х	Х
Συνδυασμός ΜΧΔ και μεθόδων Collocation.	Х	Х	

Πίνακας 4: Συνεργασίες των τριών ερευνητικών ομάδων στα πλαίσια της Δράσης 2.2.

Τεχνική Έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

Επιστημονικά άρθρα Προετοιμασία επιστημονικών άρθρων που αφορούν στην επισκόπηση μεθόδων για MDMP προβλήματα.

Πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων: Σχεδιάστηκε και υλοποιήθηκε λογισμικό σε MATLAB το οποίο χρησιμοποιήθηκε για τα πρώτα αποτελέσματα επαλήθευσης των αλγορίθμων των ΜΧΔ.

5 Συνεργασίες

Στα πλαίσια αυτής της Δράσης, συνεργάστηκαν μέλη από όλες τις ερευνητικές ομάδες με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας). Η ομάδα ΚΕΟ 2 συνεργάστηκε με την ομάδα ΚΕΟ 3 (Πανεπιστήμιο Πατρών) για μελέτη των ΜΧΔ και σχεδιασμό των αλγορίθμων τους προκειμένου να υλοποιηθούν μέσα στο FEniCS. Η ομάδα ΚΕΟ 2 συνεργάστηκε με την ομάδα ΚΕΟ 1 (Πολυτεχνείο Κρητης) για μελέτη των ΜΧΔ προκειμένου να συνδυαστούν με μεθόδους Collocation.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Κατά τη διάρκεια του 2013 καθορίσαμε το προγραμματιστικό περιβάλλον (FEniCS) που θα χρησιμοποιήσουμε στο έργο για την υλοποίηση των μαθηματικών μεθόδων. Καθορίσαμε σετ πειραμάτων για τη Δράση 2.2 και στα επόμενα βήματα μας θα υλοποιήσουμε μέσα στο FEniCS μεθόδους χαλάρωσης στις διεπαφές (ROB και GEO) σε ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα και θα συγκεντρώσουμε πειραματικά αποτελέσματα προκειμένου να υπάρξουν επιστημονικές δημοσιεύσεις.



References

- [1] D. E. Keyes, L. C. McInnes, C. Woodward, W. Gropp, E. Myra, M. Pernice, J. Bell, J. Brown, A. Clo, J. Connors, *et al.*, "Multiphysics simulations: Challenges and opportunities," *International Journal of High Performance Computing Applications*, vol. 27, no. 1, pp. 4–83, 2013.
- [2] 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, s166– s202, 1987.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] T. F. Chan and T. P. Mathew, "Domain decomposition algorithms," *Acta numerica*, vol. 3, pp. 61–143, 1994.
- [6] R. Natarajan, "Domain decomposition using spectral expansions of steklovpoincaré operators," *SIAM Journal on Scientific Computing*, vol. 16, no. 2, pp. 470–495, 1995.
- [7] J. R. Rice, E. Vavalis, and D. Yang, "Convergence analysis of a nonoverlapping domain decomposition method for elliptic pdes," 1993.
- [8] W. Heinrichs, "Domain decomposition for fourth-order problems," *SIAM journal on numerical analysis*, vol. 30, no. 2, pp. 435–453, 1993.
- [9] 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.
- [10] ——, "Fine tuning interface relaxation methods for elliptic differential equations," *Applied numerical mathematics*, vol. 43, no. 4, pp. 459–481, 2002.
- [11] P. Tsompanopoulou and E. Vavalis, "An experimental study of interface relaxation methods for composite elliptic differential equations," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 32, no. 8, pp. 1620–1641, 2008.
- [12] —, "Analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, vol. 226, no. 2, pp. 370–387, 2009.



Παράρτημα Γ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 2.3

ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ



Περιεχόμενα

1	Σκοπός	3
	1.1 Συνοπτική παρουσίαση	3
2	Μεθοδολογία	4
3	Παραδοτέα	4
4	Συνεργασίες	5
5	Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις	5



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 ΜΕ-ΘΟΔΟΙ

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 προσομοίωσης τους. Η υλοποίηση των σχημάτων αυτών σε σύγχρονα παράλληλα υπολογιστικά περιβάλλοντα παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, διότι, πέρα από τον εγγενή παραλληλισμό των στοχαστικών μεθόδων, τα εν λόγω σχήματα έχουν διάφορα επιπρόσθετα ελκυστικά χαρακτηριστικά όσο αφορά την δυνατότητα παραλληλισμού τους, όπως μικρό λόγο υπολογισμών/επικοινωνίας, ευέλικτους μηχανισμούς ελέγχου ροής, δυνατότητα εύκολης υλοποίησης σε διάφορα υπολογιστικά πρότυπα (multithreading, cluster, web services, κ.λ.π.). Η ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας (2η Ερευνητική Ομάδα) είναι η κύρια ομάδα εργασίας που θα υλοποιήσει το μεγαλύτερο μέρος της παρούσας δράσης, θα συγγράψει και θα δημοσιεύσει τα ερευνητικά αποτελέσματα, και θα συντάξει την σχετική Τεχνική Έκθεση για την περιγραφή των επιστημονικών δραστηριοτήτων και των ερευνητικών αποτελεσμάτων του έλαβαν χώρα στα πλαίσια της παρούσας δράσης.



2 Μεθοδολογία

Στόχος των δραστηριοτήτων μας το έτος 2013 ήταν βασιζόμενοι στις προσπάθειες μας το προηγούμενο έτος να διαμορφώσουμε μια γενικότερη αντίληψη και μια συγκεκριμένη μεθοδολογία αναφορικά με την γενικότερη χρήστη στοχαστικών μεθόδων για την επίλυση ντετερμινιστικών προβλημάτων Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ).

Υπάρχει μια πρωτόλεια σύνδεση συγκεκριμένων προβλημάτων ΜΔΕ με την τυχαία κίνηση σωματιδίων. Για παράδειγμα η εξίσωση της θερμότητας μπορεί να προκύψει μέσω του μέσου όρου κατά τη διάρκεια της κίνησης ενός πολύ μεγάλου αριθμού σωματιδίων. Παραδοσιακά, η προκύπτουσα ΜΔΕ μελετάται ως ντετερμινιστική εξίσωση, μια προσέγγιση που έχει φέρει πολλά σημαντικά αποτελέσματα και μια βαθιά κατανόηση της εξίσωσης και των λύσεών της. Με τη μελέτη της εξίσωσης θερμότητας όταν λαμβάνονται υπόψη τα ατομικά τυχαία σωματίδια, ωστόσο, μπορεί να κανείς να αυξήσει σημαντικά το επίπεδο κατανόησης του φυσικού φαινομένου και να αποκτήσει βαθύτερη διαίσθηση αναφορικά με το πρόβλημα. Ενώ κάτι τέτοιο είναι ιδιαίτερα επιθυμητό από πολλούς ερευνητές, η προσέγγιση αυτή δεν είναι γενικά διαδεδομένη και δεν παρουσιάζεται σε όλα τα επίπεδα. Σποραδικές μελέτες άπτονται φυσικά του θέματος. Γα παράδειγμα το βιβλίο [11], όπου ο Lawler εισάγει την εξίσωση θερμότητας συνδέοντας την στενά με την έννοια των αρμονικών συναρτήσεων μέσω μιας πιθανολογικής προοπτικής.

Κατά την διάρκεια της αναφερόμενης περιόδου προσπαθήσαμε να αποκτήσουμε μια ξεκάθαρη εικόνα για την σχέση μεταξύ τυχαίων περιπάτων και των γραμμικών ΜΔΕ ιδιαίτερα των ελλειπτικών.

Επικεντρωθήκαμε πρωτίστως στην μελέτη μιας πληθώρας σχετικών εργασιών και στον αρχικό σχεδιασμό και ανάπτυξη των μεθόδων μας. Ιδιαίτερη σημασία δώσαμε στις εξής πρόσφατες σχετικές προσπάθειες [25, 1, 3, 14, 15, 4, 12, 13, 8, 7, 17, 16, 5, 18, 9, 2, 20, 22, 19, 23, 21, 24].

3 Παραδοτέα

Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση Το παρόν κείμενο.

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



4 Συνεργασίες

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

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

5 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

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

Αναφορές

- [1] A. Bignami and E. Cupini. Monte Carlo method for finite difference equations of elliptic type in a multiregion domain. *J. Comput. Appl. Math.*, 8(2):87–92, 1982.
- [2] F. M. Buchmann and W. P. Petersen. An exit probability approach to solving high dimensional dirichlet problems. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 28(3):1153–1166, 2006.
- [3] J. M. DeLaurentis and L. A. Romero. A Monte Carlo method for Poisson's equation. *J. Comput. Phys.*, 90(1):123–140, 1990.
- [4] I. T. Dimov and T. V. Gurov. Estimates of the computational complexity of iterative Monte Carlo algorithm based on Green's function approach. *Mathematics and Computers in Simulation*, 47(2-5):183–199, 1998.
- [5] I. T. Dimov and R. Y. Papancheva. Green's function Monte Carlo algorithms for elliptic problems. *Mathematics and Computers in Simulation*, 63(6):587– 604, 2003.
- [6] J. Given and C. Hwang. Edge distribution method for solving elliptic boundary value problems with boundary singularities. *Physical Review E* - *Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics*, 68(4 2):461281–461286, 2003.



- [7] M. Griebel and M. A. Schweitzer. A particle-partition of unity method for the solution of elliptic, parabolic, and hyperbolic PDEs. *SIAM Journal of Scientific Computing*, 22(3):853–890, 2001.
- [8] S. Heinrich. The randomized information complexity of elliptic PDE. *Journal* of *Complexity*, 22(2):220–249, 2006.
- [9] Gregory F. Lawler. *Random Walk and the Heat Equation*. American Mathematical Society, Student Mathematical Library (No. 156), 2010.
- [10] R. N. Makarov. Solution of boundary value problems for nonlinear elliptic equations by the Monte Carlo method. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 14(5):453–467, 1999.
- [11] M. Mascagni, A. Karaivanova, and Y. Li. A quasi-Monte Carlo method for elliptic partial differential equations. *Monte Carlo Methods and Applications*, 7:283–294, 2001.
- [12] G. A. Mikhailov. Recurrent formulae and the Bellman principle in the Monte Carlo method. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 9(3):281–289, 1994.
- [13] G. A. Mikhailov. Solving the Dirichlet problem for nonlinear elliptic equations by the Monte Carlo method. *Siberian Mathematical Journal*, 35(5):967– 975, 1994.
- [14] G. A. Mikhailov and V. L. Lukinov. Probability representations and the Monte Carlo method for solving equations with powers of elliptic operators. *Doklady Mathematics*, 67(3):423–425, 2003.
- [15] G. Milstein and M. Tretyakov. The simplest random walks for the Dirichlet problem. *Theory of Probability and its Applications*, 47(1):53–68, 2003.
- [16] R. J. Papancheva, I. T. Dimov, and T. V. Gurov. A new class of grid-free Monte Carlo algorithms for elliptic boundary value problems, volume 2542, pages 132–139. 2003.
- [17] R. Y. Papancheva. Parallel realization of grid-free Monte Carlo algorithm for boundary value problems, volume 3743 of Lecture Notes in Computer Science, pages 181–188. Springer, 2006.
- [18] L. Roman and M. Sarkis. Stochastic Galerkin method for elliptic SPDEs: A white noise approach. *Discrete and Continuous Dynamical Systems -Series B*, 6(4):941–955, 2006.



- [19] M.N.O. Sadiku, C.M. Akujuobi, S.M. Musa, and S.R. Nelatury. Analysis of time-dependent cylindrical problems using Monte Carlo. *Microwave and Optical Technology Letters*, 49(10):2571–2573, 2007.
- [20] N. Simonov. Monte Carlo methods for solving elliptic equations with boundary conditions containing the normal derivative. *Doklady Mathematics*, 74(2):656–659, 2006.
- [21] N. Simonov. Random walks for solving boundary-value problems with flux conditions. volume 4310 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 181–188. Springer, 2007.
- [22] B. Vajargah and K. Vajargah. Monte Carlo method for finding the solution of Dirichlet partial differential equations. *Applied Mathematical Sciences*, 1(10):453–462, 2007.
- [23] J. Vrbik. Monte Carlo simulation of the general elliptic operator. J. Phys. A: Math. Gen., 20(3):2693–2697, 1987.



Παράρτημα Δ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 2.4

Μέθοδοι Μετασχηματισμού Φωκά



Περιεχόμενα

1	Σκοπός	3		
2	Μεθοδολογία			
	2.1 Πρόβλημα N Πολλαπλών-Πεδίων σε $1+1$ Διαστάσεις	3		
	2.2 Ολική Συνθήκη	4		
	2.3 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης	7		
3	Αποτελέσματα	11		
4	Παραδοτέα			
5	Συνεργασίες			
6	Μελλοντικές Δράσεις	13		



1 Σκοπός

Την περίοδο αυτή βελτιώθηκε και επεκτάθηκε ο μαθηματικός φορμαλισμός της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά για γραμμικές ΜΔΕ με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης, ώστε η παραγόμενη αναλυτική λύση να συμπεριλάβει τη γενικευμένη περίπτωση των πολλαπλών χωρίων με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών.

2 Μεθοδολογία

2.1 Πρόβλημα N Πολλαπλών-Πεδίων σε 1 + 1 Διαστάσεις

Θεωρούμε αδιάστατο Πρόβλημα Αρχικών και Συνοριακών Τιμών (ΠΑΣΤ) :

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

το οποίο μέσω του κλασικού εκθετικού μετασχηματισμού

$$c(x,t) = e^t u(x,t) \tag{2}$$

γράφεται ισοδύναμα και ως

$$\begin{cases}
 u_t = (Du_x)_x, & x \in [a, b], & t \ge 0 \\
 u_x(a, t) = 0 & \text{KCI} & u_x(b, t) = 0 \\
 u(x, 0) = f(x) := \sum_{i=1}^M \delta(x - \xi_i), & \xi_i \in (a, b)
\end{cases}$$
(3)

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

Θεωρώντας ότι το διάστημα [a, b] είναι χωρισμένο σε n + 1 περιοχές $R_j := (w_{j-1}, w_j)$, με $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < \ldots < w_n < w_{n+1} \equiv b$, ο συντελεστής διάχυσης D = D(x), ο οποίος είναι ασυνεχής και χαρακτηρίζει τον multi domain χαρακτήρα του προβλήματος, ορίζεται ως (βλ. σχήμα 1):

$$D(x) = \gamma_j , \ x \in R_j , \ j = 1, \dots, n+1$$
 (4)

Στο σχήμα 2 αναπαρίσταται γραφικά το πρόβλημα, το οποίο και θεωρείται πολλαπλών πεδίων αφού σε κάθε περιοχή η μερική διαφορική εξίσωση που καλούμαστε να επιλύσουμε είναι διαφορετική.





Σχήμα 1: Ο ασυνεχής συντελεστής διάχυσης σε n+1 περιοχές.



Σχήμα 2: Το πρόβλημα αρχικών τιμών σε n + 1 περιοχές.

2.2 Ολική Συνθήκη

Η παραβολική φύση του προβλήματος συνεπάγεται τη συνέχεια των u και Du_x σε κάθε σημείο διεπαφής w_j . Δηλαδή

$$u(w_j, t) := \lim_{x \to w_j^+} u(x, t) = \lim_{x \to w_j^-} u(x, t), \quad \forall j = 1, 2, \dots, n$$
(5)

$$Du_x(w_j,t) := \lim_{x \to w_j^+} D(x)u_x(x,t) = \lim_{x \to w_j^-} D(x)u_x(x,t), \quad \forall j = 1, 2, \dots, n.$$
 (6)

Έστω $u^{(j)}(x,t)$ η λύση του προβλήματος στο διάστημα $\overline{R_j}:=[w_{j-1},w_j].$

$$u^{(j)}(x,t) := \begin{cases} u(x,t), & x \in R_j \\ \lim_{x \to w_{j-1}^+} u(x,t), & x = w_{j-1} \\ \lim_{x \to w_j^-} u(x,t), & x = w_j \end{cases}$$
(7)



και επομένως

$$u_x^{(j)}(w_{j-1},t) := \lim_{x \to w_{j-1}^+} u_x(x,t) \quad \text{Kal} \quad u_x^{(j)}(w_j,t) := \lim_{x \to w_j^-} u_x(x,t) .$$
 (8)

Τότε θα ισχύει

$$u_t^{(j)} = (\gamma_j u_x^{(j)})_x = \gamma_j u_{xx}^{(j)} , \qquad (9)$$

και χρησιμοποιώντας τους περιορισμούς (5)-(6), έχουμε επίσης ότι:

$$u^{(j)}(w_j,t) = u^{(j+1)}(w_j,t) \quad \text{Kal} \quad \gamma_j u_x^{(j)}(w_j,t) = \gamma_{j+1} u_x^{(j+1)}(w_j,t) .$$
 (10)

Στην περιοχή $\overline{R_j}$ παρατηρούμε ότι η $u^{(j)}(x,t)$ ικανοποιεί την εξίσωση :

$$u_t^{(j)} = (\gamma_j u_x^{(j)})_x = \gamma_j u_{xx}^{(j)}$$
(11)

και η formal adjoint $\tilde{u}_t^{(j)}$ ικανοποιεί την εξίσωση:

$$-\tilde{u}_t^{(j)} = \gamma_j \tilde{u}_{xx}^{(j)} .$$
(12)

Πολλαπλασιάζοντας τις εξισώσεις (9) και (12) με \tilde{u} και u, αντίστοιχα, και αφαιρόντας τις εξισώσεις που παράγονται καταλήγουμε στην :

$$(u^{(j)}\tilde{u}^{(j)})_t - (\gamma_j u_x^{(j)}\tilde{u}^{(j)} - \gamma_j u^{(j)}\tilde{u}_x^{(j)})_x = 0.$$
(13)

Δεδομένου ότι μια μονοπαραμετρική οικογένεια λύσεων της (12) δίνεται από τη σχέση:

$$\tilde{u}^{(j)}(x,t,k) = e^{-ikx + \gamma_j k^2 t}, \ k \in \mathbb{C}.$$
(14)

η εξίσωση (13) γίνεται:

$$(e^{-ikx+\gamma_jk^2t}u)_t - (e^{-ikx+\gamma_jk^2t}\gamma_j(u_x+iku))_x, \ k \in \mathbb{C},$$
(15)

η οποία είναι η divergence form της εξίσωσης (9). Ολοκληρώνοντας στην περιοχή $A_j := \{(x,t) : x \in \overline{R_j}, 0 \le t \le T\}$ και χρησιμοποιώντας το θεώρημα του



Green καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\int_{w_{j-1}}^{w_{j}} e^{-ikx} f^{(j)}(x) dx - \int_{w_{j-1}}^{w_{j}} e^{-ikx + \gamma_{j}k^{2}T} u^{(j)}(x,T) dx$$

$$- \int_{0}^{T} e^{-ikw_{j-1} + \gamma_{j}k^{2}t} \gamma_{j}(u_{x}^{(j)}(w_{j-1},t) + iku^{(j)}(w_{j-1},t)) dt$$

$$+ \int_{0}^{T} e^{-ikw_{j} + \gamma_{j}k^{2}t} \gamma_{j}(u_{x}^{(j)}(w_{j},t) + iku^{(j)}(w_{j},t)) dt = 0.$$
 (16)

Αν η $f^{(j)}(x)$ είναι η αρχική συνθήκη στην $\overline{R_j}$,

$$f^{(j)}(x) = f|_{\overline{R_i}}(x)$$

 $\widehat{f}^{(j)}(x)$ και $\widehat{q}^{(j)}(k,t)$ είναι η μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων $f^{(j)}(x)$ και $u^{(j)}(x,t)$, αντίστοιχα

$$\widehat{f}^{(j)}(k) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x) dx$$
(17)

$$\widehat{u}^{(j)}(k,t) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} u^{(j)}(x,t) dx,$$
(18)

και $\widetilde{u}^{(j)}$ και $\widetilde{u}^{(j)}_x$ δίνονται από τις σχέσεις :

$$\widetilde{u}^{(j)}(x,\gamma_j k^2) := \int_0^T e^{\gamma_j k^2 t} u^{(j)}(x,t) dt$$
(19)

$$\widetilde{q}_{x}^{(j)}(x,\gamma_{j}k^{2}) := \int_{0}^{T} e^{\gamma_{l(j)}k^{2}t} u_{x}^{(j)}(x,t)dt.$$
(20)

τότε η εξίσωση (16) παίρνει τη μορφή:

$$e^{\gamma_{j}k^{2}T}\widehat{u}^{(j)}(k,T) = \widehat{f}^{(j)}(k) - \gamma_{j}e^{-ikr_{j-1}}(\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j-1},\gamma_{j}k^{2}) + ik\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},\gamma_{j}k^{2})) + \gamma_{j}e^{-ikr_{j}}(\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j},\gamma_{j}k^{2}) + ik\widetilde{u}^{(j)}(w_{j},\gamma_{j}k^{2})),$$
(21)



Δ2.4/7

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$. Η (21) ισχύει για όλα τα $t \in [0, T]$. Αντικαθιστώντας το T με t έχουμε :

$$e^{\gamma_{j}k^{2}t}\widehat{u}^{(j)}(k,t) = \widehat{f}^{(j)}(k) - \gamma_{j}e^{-ikw_{j-1}} [\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j-1},\gamma_{j}k^{2}) + ik\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},\gamma_{j}k^{2})] + \gamma_{j}e^{-ikw_{j}} [\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j},\gamma_{j}k^{2}) + ik\widetilde{u}^{(j)}(w_{j},\gamma_{j}k^{2})],$$
(22)

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$. Η τελευταία εξίσωση καλείται "Ολική Συνθήκη".

2.3 Ολοκληρωτική Αναπαράσταση της Λύσης

Θέτοντας $\lambda_j^2 = \gamma_j k^2$ και $c_j = \gamma_j^{-\frac{1}{2}}$ an στην εξίσωση (22) και στη συνέχεια μετονομάζοντας το λ to k η σχέση γίνεται:

$$e^{k^{2}t}\widehat{u}^{(j)}(c_{j}k,t) = \widehat{f}^{(j)}(c_{j}k) - \gamma_{j}e^{-ic_{j}kw_{j-1}}(\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j-1},k^{2}) + ic_{j}k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^{2})) + \gamma_{j}e^{-ic_{j}kw_{j}}(\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j},k^{2}) + ic_{j}k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j},k^{2})),$$
(23)

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$. Αντιστρέφοντας τους μετασχηματισμούς Fourier $\widehat{u}^{(j)}(c_jk,t)$ στην εξίσωση (23) έχουμε:

$$\begin{aligned} u^{(j)}(x,t) &= \frac{c_j}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j kx - k^2 t} \widehat{f}^{(j)}(c_j k) dk \\ &- \frac{1}{2\pi c_j} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x - w_{j-1}) - k^2 t} \left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1}, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1}, k^2) \right] dk \\ &- \frac{1}{2\pi c_j} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x - w_j) - k^2 t} \left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j, k^2) + ic_j k \widetilde{u}^{(j)}(w_j, k^2) \right] dk. \end{aligned}$$

(24)

Στην παραπάνω έκφραση για την λύση $u^{(j)}(x,t)$ εμφανίζονται οι άγνωστες ποσότητες :

•
$$\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)$$
 για κάθε $j=1,2,\ldots,n+1$


- $\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)$ για κάθε $j=1,2,\ldots,n+1$
- $\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j-1},k^2)$ για κάθε $j=2,3,\ldots,n+1$
- $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2)$ үга ка́hetaе $j=1,2,\ldots,n$.

Για τον καθορισμό τους, χρησιμοποιούμε κατ' αρχήν την απεικόνιση $k \to -k$ και γράφουμε την εξίσωση (22) ως :

$$e^{k^{2}t}\widehat{u}^{(j)}(-c_{j}k,t) = \widehat{f}^{(j)}(-c_{j}k) - \gamma_{j}e^{ic_{j}kw_{j-1}}(\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j-1},k^{2}) - ic_{j}k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^{2}) + \gamma_{j}e^{ic_{j}kw_{j}}(\widetilde{u}_{x}^{(j)}(w_{j},k^{2}) - ic_{j}k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j},k^{2}),$$
(25)

για όλα τα $k \in \mathbb{C}$.

Στη συνέχεια, λαμβάνοντας υπόψιν τόσο τους περιορισμούς (10) όσο και τις συνοριακές συνθήκες, οι ολικές συνθήκες (23) (25) γίνονται :

• yia j = 1:

$$ic_{1}\gamma_{1}ke^{-ic_{1}kr_{0}}\widetilde{u}^{(1)}(w_{0},k^{2}) - ic_{1}\gamma_{1}ke^{-ic_{1}kw_{1}}\widetilde{u}^{(1)}(w_{1},k^{2}) + \gamma_{1}e^{-ic_{1}kw_{1}}\widetilde{u}^{(1)}_{x}(w_{1},k^{2}) = \widehat{f}(c_{1}k)$$
(26)

$$-ic_{1}\gamma_{1}ke^{ic_{1}kw_{0}}\widetilde{u}^{(1)}(w_{0},k^{2}) + ic_{1}\gamma_{1}ke^{ic_{1}kw_{1}}\widetilde{u}^{(1)}(w_{1},k^{2}) - \gamma_{1}e^{-ic_{1}kw_{1}}\widetilde{u}^{(1)}_{x}(w_{1},k^{2}) = \widehat{f}(-c_{1}k),$$
(27)

$$\begin{aligned} & \forall \mathbf{\Omega} \ j = 2, 3, \dots, n: \\ & i c_j \gamma_j k e^{-i c_j k w_{j-1}} \widetilde{u}^{(j-1)}(w_{j-1}, k^2) + \gamma_{l(j-1)} e^{-i c_j k w_{j-1}} \widetilde{u}^{(j-1)}_x(w_{j-1}, k^2) \\ & -i c_j \gamma_j k e^{-i c_j k w_j} \widetilde{u}^{(j)}(r_j, k^2) - \gamma_j e^{-i c_j k r_j} \widetilde{u}^{(j)}_x(r_j, k^2) \ &= \ \widehat{f}(c_j k) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (28) \end{aligned}$$



$$-ic_{j}\gamma_{j}ke^{ic_{j}kw_{j-1}}\widetilde{u}^{(j-1)}(w_{j-1},k^{2}) + \gamma_{j-1}e^{ic_{j}kw_{j-1}}\widetilde{u}^{(j-1)}_{x}(w_{j-1},k^{2}) +ic_{j}\gamma_{j}ke^{ic_{j}kw_{j}}\widetilde{u}^{(j)}(w_{j},k^{2}) - \gamma_{j}e^{-ic_{j}kw_{j}}\widetilde{u}^{(j)}_{x}(w_{j},k^{2}) = \widehat{f}(-c_{j}k),$$
(29)

•
$$\gamma_{I}\alpha_{j} = n + 1$$
:

$$ic_{l(n+1)}\gamma_{n+1}ke^{-ic_{n+1}kr_{n}}\widetilde{u}^{(n)}(w_{n},k^{2}) + \gamma_{n}e^{-ic_{n+1}kw_{n}}\widetilde{u}^{(n)}_{x}(w_{n},k^{2})$$
$$-ic_{n+1}\gamma_{n+1}ke^{-ic_{n+1}kw_{n+1}}\widetilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1},k^{2}) = \widehat{f}(c_{n+1}k)$$
(30)

$$-ic_{n+1}\gamma_{n+1}ke^{ic_{n+1}kr_{n}}\widetilde{u}^{(n)}(w_{n},k^{2}) + \gamma_{n}e^{ic_{n+1}kr_{n}}\widetilde{u}^{(n)}_{x}(w_{n},k^{2}) +ic_{n+1}\gamma_{n+1}ke^{ic_{n+1}kw_{n+1}}\widetilde{u}^{(n+1)}(w_{n+1},k^{2}) = \widehat{f}(-c_{n+1}k).$$
(31)

Τέλος, συνδυασμός των παραπάνω εξισώσεων μας οδηγούν στο $2(n+1)\times 2(n+1)$ γραμμικό σύστημα

$$G\widetilde{\mathbf{u}} = \widehat{\mathbf{f}},$$
 (32)

με



$$\widetilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \widetilde{u}^{(1)}(w_0, k^2) \\ \widetilde{u}^{(1)}(w_1, k^2) \\ \widetilde{u}^{(1)}_x(w_1, k^2) \\ \vdots \\ \widetilde{u}^{(n)}_x(w_n, k^2) \\ \widetilde{u}^{(n)}_x(w_n, k^2) \\ \widetilde{u}^{(n+1)}_x(w_{n+1}, k^2) \end{bmatrix} \quad \mathbf{Kal} \quad \widetilde{\mathbf{f}} = \begin{bmatrix} \widehat{f}^{(1)}(c_1k) \\ \widehat{f}^{(1)}(-c_1k) \\ \widehat{f}^{(2)}(c_2k) \\ \widehat{f}^{(2)}(-c_2k) \\ \vdots \\ \widehat{f}^{(2)}(-c_2k) \\ \vdots \\ \widehat{f}^{(n)}(c_nk) \\ \widehat{f}^{(n)}(-c_nk) \\ \widehat{f}^{(n+1)}(c_{n+1}k) \\ \widehat{f}^{(n+1)}(-c_{n+1}k) \end{bmatrix}$$

και τις τιμές των $A_i^{(j)}$ να δίνονται από

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|} i & A_i^{(j)} \\ \hline 1 & ic_j \gamma_j k e^{-ic_j k w_{j-1}} \\ 2 & \gamma_{j-1} e^{-ic_j k w_{j-1}} \\ 3 & -ic_j \gamma_j k e^{-ic_j k w_j} \\ 4 & -\gamma_j e^{-ic_j k w_j} \\ 5 & -ic_j \gamma_j k e^{ic_j k w_{j-1}} \\ 6 & \gamma_{j-1} e^{ic_j k w_{j-1}} \\ 7 & ic_j \gamma_j k e^{ic_j k w_j} \\ 8 & -\gamma_j e^{ic_j k w_j} \end{array}$$

η λύση του οποίου προσδιορίζει τις άγνωστες ποσότητες $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2)$ και $\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)$, και συνεπώς και όλες τις λύσεις $u^{(j)}(x,t)$, $j = 1, \cdots, n$ που περιγράφονται σε κλειστή μορφή από τη σχέση (24).

Για την αριθμητική αποτίμηση της σχέσης (24) χρησιμοποιήσαμε αποτελεσματικά τις μεθόδους αριθμητικής ολοκλήρωσης σε υπερβολικές καμπύλες (contours) που περιγράφουμε στην αντίστοιχη Τεχνική Έκθεση 2012, και συνεπώς τα παραλείπουμε.



3 Αποτελέσματα

Αποτελέσματα σχετικά με την συμπεριφορά της μεθόδου σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου έχουν συμπεριληφθεί στην Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2 έτους 2013. Εδώ παραθέτουμε, για λόγους πληρότητας, ένα παράδειγμα, για να επιδείξουμε την συμπεριφορά κυρίως της μεθόδου.

Τα δεδομένα που χρησιμοποιήσαμε για τα αριθμητικά μας αποτελέσματα (ακολουθώντας το [4]) περιλαμβάνουν το διάστημα [a,b] = [-4,5], τα σημεία διεπαφής $[w_1, w_2, w_3, w_4, w_5] = [-2, -1.5, 0, 3, 4]$ των πολλαπλών περιοχών, τον συντελεστή διάχυσης $\gamma_j = D_g/D_w = 0.2$ για όλα τα $j = 1, 3, \ldots, n + 1$ και δύο πηγές καρκινικών κυττάρων με κέντρα στα σημεία $\xi_1 = -3$ και $\xi_2 = 2.5$.

Στο γράφημα 3 παρουσιάζεται η διάχυση του καρκινικού όγκου σε διάφορα χρονικά βήματα. Παρατηρείστε ότι η λύση είναι συνεχής και παραγωγίσιμη σε όλο το διάστημα εκτός των σημείων διεπαφής όπου είναι μόνο συνεχής.



Σχήμα 3: Χρονική εξέλιξη του πυκνότητας του όγκου c(x,t).



Το σχετικό σφάλμα, που απεικονίζεται στο γράφημα 4, δίνεται από τη σχέση:

$$E_N := \frac{\|u_{N_{i+1}} - u_{N_i}\|_{\infty}}{\|u_{N_{i+1}}\|_{\infty}}$$

με N να δηλώνει τον αριθμό των σημείων ολοκλήρωσης και u_N είναι η αντίστοιχη αριθμητική λύση. Παρατηρήστε την ταχεία πτώση του σφάλματος καθώς αυξάνονται τα σημεία ολοκλήρωσης.





4 Παραδοτέα

 Μ. Ασβεστάς, Α. Σηφαλάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, "Fokas method for a multi-domain linear reaction-diffusion equation with discontinuous



diffusivity", 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013

 Μ. Ασβεστάς, "Εφαρμογή της μεθόδου Φωκά στο μαθηματικό μοντέλο διάχυσης των καρκινικών κυττάρων σε n+1 εγκεφαλικές περιοχές", Μεταπτυχιακή Διατριβή 2013

5 Συνεργασίες

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

6 Μελλοντικές Δράσεις

- Επέκταση της μεθόδου Φωκά σε N περιοχές στις 1 + 1 διαστάσεις με συντελεστή διάχυσης D(x, t) εξαρτώμενο και από τον χρόνο.
- Επέκταση της μεθόδου Φωκά στις 2+1 διαστάσεις.

Αναφορές

- [1] 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.
- [2] Murray JD Mathematical Biology, Springer-Verlag, 2002
- [3] Swanson KR, Alvord EC Jr και Murray JD A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter, Cell Proliferation, 33, 317-329, 2000.
- [4] Mantzavinos D, Papadomanolaki MG, Saridakis YG και Sifalakis AG, A novel transform approach for a brain tumor invasion model



with heterogeneous diffusion in 1+1 dimensions, Applied Numerical Mathematics, submitted

- [5] K.R.Swanson Mathematical modeling of the growth and control of tumors, *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [6] 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.
- [7] 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.



Παράρτημα Ε΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1



Ετήσια Τεχνική Έκθεση Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 3.1

Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud



Πίνακας Περιεχομένων

1. ΣΚΟΠΟΣ	
1.1. Υλοποιήση σε Clusters, Grids kai Cloud	
1.2. Σύγκερασμός Αριωμητικών Μεθόδων και Λογισμικού	
2. ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ	4
2.1. ΜΈΘΟΔΟΙ ΧΑΛΆΡΩΣΗΣ ΣΤΗ ΔΙΕΠΑΦΉ	4
2.1.1. Εισαγωγή	
2.1.2. Διακριτοποίηση πεδίου με επαναληπτική χαλάρωση στις διεπαφές	5
2.1.3. Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή	8
2.2. Εφαρμογή ένος υβριδικού παράλληλου Monte Carlo επιλύτη ΜΔ	ΔΕ ΣΕ
ΟΡΘΟΓΏΝΙΑ ΠΟΛΛΑΠΛΆ ΠΕΔΊΑ	14
2.2.1 Εισαγωγή	14
2.2.2. Ανάλυση βασικού αλγορίθμου	
Περιγραφή βασικού αλγορίθμου	
Profiling βασικού κώδικα	
2.2.3. Υβριδική προσέγγιση παραλληλοποίησης	
3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ	17
3.1. Υλοποιήση μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή	
3.2. ΠΕΙΡΑΜΑΤΙΚΆ ΑΠΟΤΕΛΈΣΜΑΤΑ ΣΕ CLUSTERS ΠΆΝΩ ΑΠΌ CLOUD	
3.3. Σύγγκερασμός Αριωμητικών Μεθόδων και Λογισμικού	
4. ПАРАДОТЕА	
5. ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ	
6. ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΕΙΣ	
7. ВІВЛІОГРАФІА	



1. Σκοπός

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

1.1. Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud

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

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

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

1.2. Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού.

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



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

2. Μεθοδολογία

2.1. Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή

2.1.1. Εισαγωγή

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

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

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

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



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

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

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

2.1.2. Διακριτοποίηση πεδίου με επαναληπτική χαλάρωση στις διεπαφές

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

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

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



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

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

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



Εικόνα 1: Ο μηχανισμός χαλάρωσης στη διεπαφή



Για την επίσημη περιγραφή της μεθόδου θεωρούμε το ακόλουθο πρόβλημα:

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

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

$$D_{i}u = f_{i} \text{ in } \Omega_{i},$$

$$G_{i,i}u = 0 \text{ on } \partial\Omega_{i} \cap \partial\Omega_{i} \setminus \partial\Omega \forall j \neq i, \quad B_{i}u = c_{i} \text{ on } \partial\Omega_{i} \cap \partial\Omega$$
⁽²⁾

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

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

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



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

2.1.3. Μέθοδοι χαλάρωσης στη διεπαφή

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

Η μέθοδος Dirichlet/Neumann Averaging (AVE)

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

for
$$k = 0, 1, 2, .$$

..

•
$$u^{\left(k+\frac{1}{2}\right)} = solve_p de(ui) \sigma \varepsilon \kappa \dot{\alpha} \theta \varepsilon \upsilon \pi \sigma \pi \varepsilon \delta \dot{\alpha}$$

•
$$dui = \beta \frac{\partial u_R^{(\kappa+2)}}{\partial u_R} + (1-\beta) \frac{\partial u_L^{(\kappa+2)}}{\partial u_L} \sigma \varepsilon \kappa \dot{\alpha} \theta \varepsilon \, \delta i \varepsilon \pi \alpha \varphi \dot{\eta}$$

•
$$u^{(k+1)} = \text{solve nde}(dui) \sigma \epsilon \kappa \dot{\alpha} \theta \epsilon u \pi \sigma \pi \epsilon \delta \dot{\alpha}$$

•
$$ui = \alpha u_{p}^{(k+1)} + (1-\alpha) u_{a}^{(k+1)} \sigma \varepsilon \kappa \dot{\alpha} \theta \varepsilon \delta i \varepsilon \pi \alpha \omega \dot{\eta}$$



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

Η Geometric (GEO) Contraction Based μέθοδος

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



Εικόνα 2: Ο μηχανισμός χαλάρωσης της μεθόδου GEO

Η GEO μπορεί αλγοριθμικά να αποδοθεί ως εξής:



for k = 0,1,2, ... • $ui^{(k+1)} = \frac{u_L^{(k)} + u_R^{(k)}}{2} - \frac{w_L w_R}{w_L + w_R} (\frac{\partial u_L^{(k)}}{\partial x} - \frac{\partial u_R^{(k)}}{\partial x}) \sigma \varepsilon \kappa \dot{\alpha} \theta \varepsilon \delta i \varepsilon \pi \alpha \varphi \dot{\eta}$ • $u^{(k+1)} = solve_pde(ui^{(k+1)}) \sigma \varepsilon \kappa \dot{\alpha} \theta \varepsilon \upsilon \pi \sigma \pi \varepsilon \delta i \sigma$

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

Η μέθοδος Newton (NEW)

Μια ακόμα νέα ιδέα είναι η χρήση της διακριτής μεθόδου Newton για την ανανέωση των τιμών στη διεπαφή σύμφωνα με την ακόλουθη διαδικασία: **Βήμα 0**: Για i = 1,2,

$$\begin{split} \mu & \text{ansatz} \quad \mu (i) \quad u_R^{(i)}, u_L^{(i)} \sigma \tau i \varsigma \ \delta i \varepsilon \pi \alpha \varphi \acute{\epsilon} \varsigma \ \kappa \alpha i \ \upsilon \pi \sigma \lambda \acute{\delta} \gamma i \sigma \varepsilon \ \tau \alpha \ \frac{\partial u_L^{(i)}}{\partial x}, \frac{\partial u_L^{(i)}}{\partial x} \\ \mathbf{B} & \text{h} \boldsymbol{\mu} \boldsymbol{\alpha} \ \mathbf{1} \colon \Upsilon \pi \sigma \lambda \acute{\delta} \gamma i \sigma \varepsilon \ \tau \alpha \ \delta_L \ \kappa \alpha i \ \delta_R \ \acute{\omega} \sigma \tau \varepsilon \ \sigma \varepsilon \ \acute{\delta} \lambda \varepsilon \varsigma \ \tau i \varsigma \ \delta i \varepsilon \pi \alpha \varphi \acute{\epsilon} \varsigma \ \nu \alpha \ \acute{\epsilon} \chi \sigma \upsilon \mu \varepsilon : \\ & (u_L^{(2)} + \delta_L) \ - \left(u_R^{(2)} + \delta_R \right) = 0 \end{split}$$

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

Βήμα 2: Εφάρμοσε γραμμικοποίηση για να επιλύσεις προσεγγιστικά τις εξισώσεις: $(u_L^{(2)} + \delta_L) - (u_R^{(2)} + \delta_R) = 0$

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

Βήμα 3: Προσέγγισε τις άγνωστες παραγώγους με διαφορές:

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



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

Bήµα 4: Λύσε ως προς δ_L και δ_R
 $\delta_L - \delta_R = u_R^{(2)} - u_L^{(2)} = 0$
 $A_L \delta_L - A_R \delta_R = \frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x}$
 $\omega \sigma \tau \varepsilon \delta_L = \delta_R = \delta = \left[\frac{\partial u_R^{(2)}}{\partial x} - \frac{\partial u_L^{(2)}}{\partial x} \right] / (A_L - A_R).$

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

$$for \ k = 2,3,4 \dots$$
• $\Lambda \dot{\upsilon} \sigma \varepsilon \tau \iota \varsigma \, \delta \iota \rho \theta \dot{\omega} \sigma \varepsilon \iota \varsigma \, \delta_L = \delta_R =$
 $\delta \, a \pi \dot{o} \, \tau \sigma \, \sigma \dot{\upsilon} \sigma \tau \eta \mu a \, \tau \omega \nu \, \delta \iota \varepsilon \pi a \varphi \dot{\omega} v:$
 $\circ (u_L^{(k)} + \delta_L) - (u_R^{(k)} + \delta_R) = 0$
 $\circ \frac{\partial u_L^{(k)}}{\partial x} (u_L^{(k)} + \delta_L) - \frac{\partial u_R^{(k)}}{\partial x} (u_R^{(k)} + \delta_R) = 0$
• $u i^{(k+1)} = u i^{(k)} + \delta \, \sigma \varepsilon \, \kappa \dot{a} \theta \varepsilon \, \delta \iota \varepsilon \pi a \varphi \dot{\eta}$
• $u^{(k+1)} = solve_pde(u i^{(k+1)}) \, \sigma \varepsilon \, \kappa \dot{a} \theta \varepsilon \, \upsilon \pi \sigma \pi \varepsilon \delta i \varepsilon$

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

Η μέθοδος Robin Relaxation (ROB)

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



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

$$\Sigma \varepsilon \ \kappa \dot{\alpha} \theta \varepsilon \ \upsilon \pi \sigma \pi \varepsilon \delta (o \ \lambda \dot{\upsilon} \sigma \varepsilon)$$

$$\bullet \ Lu^{(k+1)} = f \in \Omega \ \mu \varepsilon$$

$$\bullet \ -\frac{\partial u^{(k+1)}}{\partial x} + \lambda u^{(k+1)} =$$

$$-\frac{\partial u^{(k)}_L}{\partial x} + \lambda u_L^{(k)} \sigma \tau \eta \nu \ \alpha \rho_I \sigma \tau \varepsilon \rho \eta \ \delta_I \varepsilon \pi \alpha \varphi \eta \ \tau o \upsilon \ \upsilon \pi \sigma \pi \varepsilon \delta (o \upsilon \upsilon \tau)$$

$$\bullet \ \frac{\partial u^{(k+1)}_R}{\partial x} + \lambda u^{(k+1)} =$$

$$\frac{\partial u^{(k)}_R}{\partial x} + \lambda u^{(k+1)} =$$

$$\frac{\partial u^{(k)}_R}{\partial x} + \lambda u^{(k)} \sigma \tau \eta \ \delta \varepsilon \xi_I \dot{\alpha} \ \delta_I \varepsilon \pi \alpha \varphi \eta \ \tau o \upsilon \ \upsilon \pi \sigma \pi \varepsilon \delta (o \upsilon \upsilon)$$

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

Η μέθοδος Schur Complement (SCO)

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



for k = 0,1,2,...• $u1_L = u, u1_R = \theta_1 u_2^{(k)} + (1 - \theta_1) u_1^{(k)}$ • $u_1^{(k+1)} = solve_p de(u1_L, u1_R)$ • for i = 2, ..., p - 1• $dui_L = \frac{\partial u_{l-1}^{(k+1)}}{\partial x}$ • $ui_R = \theta_l u_{l+1}^{(k)} + (1 - \theta_l) u_l^{(k)}$ • $u_l^{(k+1)} = solve_p de(ul_R, dul_L)$ • $up_R = u, dup_L = \frac{\partial u_{p1}^{(k+1)}}{\partial x}$ • $u_p^{(k+1)} = solve_p de(up_R, dup_L)$

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

Η μέθοδος Shooting (SHO)

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

for k = 0,1,2, ...
•
$$a^{(k+1)} = \frac{a^{(k)}|D(ui^{(k+1)})|}{|D(ui^{(k)}) - D(ui^{(k+1)})|})$$
σε κάθε διεπαφή
• $ui^{(k+2)} = ui^{(k)} - \alpha^{(k+1)}D(ui^{(k)})$ σε κάθε διεπαφή
• $u^{(k+2)} = solve_pde(ui^{(k+2)})$ σε κάθε υποπεδίο



Η μέθοδος του Steklov-Poincaré τελεστή (NEW)

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

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

2.2.1 Εισαγωγή

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

2.2.2. Ανάλυση βασικού αλγορίθμου

Περιγραφή βασικού αλγορίθμου

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



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

```
Προσδιόρισε τις συντεταγμένες των κόμβων όλων των υποπεδίων
Για κάθε κόμβο
Δημιούργησε μια δουλειά
Ανάθεσε τη δουλειά σε ένα νήμα
Εκτέλεσε Monte Carlo για να υπολογίσεις
τις τιμές των κόμβων
Χρησιμοποίησε μια (2|3) διαστάσεων συνάρτηση
παρεμβολής για να βρεις νέα όρια
Για κάθε υποπεδίο
Δημιούργησε μια δουλειά
Ανάθεσε τη δουλειά σε ένα νήμα
Λύσε με Laplace επιλυτή
Πάραξε τα αποτελέσματα
```

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

Profiling βασικού κώδικα

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

Πρόβλημα	dim	Dlen	Subd	Dect	Decc	nppp	Btol
1	2D	1.1.	24	n u	.3	12 12	1e-15
2	2D	1.1.	24	n n	.3 .25 .5 .7	12 12	1e-15
3	2D	1.1.	24	n n	.3 .25 .5 .7	12 12	1e-15
4	3D	1.1.	332	u u	5 5 5 5	12 12	1e-15



		1.5		u			
5	3D	1. 1. 1.5	332	u n u	.5 .55 5 5 5 5 5	555577	1e-15
6	3D	1. 1. 1.5	332	n n n	.5 .4 .5 .55 1.2 5 5 5 5	555577	1e-15
7	3D	1. 1. 1.5	332	n n n	.5 .4 .5 .55 1.2 5 5 5 5	555577	1e-15

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικά προβλημάτων εισόδου

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

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

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

Πίνακας 2: Ανάλυση απόδοσης

2.2.3. Υβριδική προσέγγιση παραλληλοποίησης

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

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



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

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

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

3. Αποτελέσματα

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

3.1. Υλοποίηση μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή

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



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

Πίνακας 3: Ιδιότητες των επτά μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή

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

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

3.2. Πειραματικά αποτελέσματα σε Clusters πάνω από Cloud

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

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

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



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

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

Πίνακας 4: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 1

Πρόβλημα				2			
Np	1	2	4	8	16	32	64
Nt	1	2	4	6	6	8	8
40K	26	9	7	4	3	3	4
80K	50	14	10	6	4		5
160K	99	25	19	9	6	7	9
=	- 170 0	. ,	,	10	10	1 0	

Πίνακας 5: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 2

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

Πίνακας 6: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 3

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

Πίνακας 7: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 4

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

Πίνακας 8: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 5



παϊκό Κοινωνικό Ταμείο

Ευα

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ επένδυση στην μοινωνία της χνώσης



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

Πίνακας 9: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 6

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

Πίνακας 10: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – πρόβλημα 7

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

Πίνακας 11: Υβριδικοί χρόνοι εκτέλεσης – άθροισμα

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

Πίνακας 12: Επιτάχυνση

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

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





Εικόνα 3: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 2



Εικόνα 4: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 4



Εικόνα 5: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 6





Εικόνα 6: Χρόνος εκτέλεσης και επιτάχυνση - Πρόβλημα 7

3.3. Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων και Λογισμικού

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

4. Παραδοτέα

Η παρούσα Ετήσια Έκθεση Προόδου του φυσικού αντικειμένου.

5. Συνεργασίες

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

6. Μελλοντικές Δράσεις

Η KEO3, στο επόμενο διάστημα θα ασχοληθεί με την παράλληλη υλοποίηση των μεθόδων Interface Relaxation σε clusters και την αξιολόγηση της απόδοσης των παράλληλων υλοποιήσεων της παραπάνω μεθόδου. Σε σχέση με την υλοποίηση του υβριδικού επιλυτή διαφορικών εξισώσεων με χρήση Monte Carlo, τα μελλοντικά μας σχέδια περιλαμβάνουν την παραλληλοποίηση του επιλυτή Laplace σε μηχανήματα



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

7. Βιβλιογραφία

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



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



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



Παράρτημα ΣΤ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2



Ετήσια Τεχνική Έκθεση Έτος 2013

⊇H∕V+⊖ 🖭

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 3.2

ΥΛΟΠΟΙΗΣΗ ΣΕ FPGAs ΚΑΙ ΠΟΛΥΠΥΡΗΝΑ ΣΥΣΤΗΜΑΤΑ (MULTICORES / MANYCORES)



Πίνακας Περιεχομένων

1. ΣKO	ΟΠΟΣ	
2.	Υλοποιήση PDEs σε ετερογένες σύστημα CPU/GPU με την χρήση	
ΠΟΛΥΕΔΡΙΚΟΎ	МОНТЕЛОҮ	3
2.1.	Εισαγωγή	3
2.2.	Πολγεδρικό Μοντελο	4
2.3.	ΠΛΑΊΣΙΟ ΑΝΆΛΥΣΗΣ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ ΔΕΔΟΜΈΝΩΝ	5
2.4.	Αποτελέσματα της μεθόδου για PDEs	9
3. BIB	ΛΙΟΓΡΑΦΙΑ	12


1. Σκοπός

Η έκθεση για το 2013 παρουσιάζει την πρόοδο της Δράσης 3.2 στις δύο πλατφόρμες CPU/GPU και FPGA δίδοντας έμφαση στην ανάπτυξη εργαλείων που θα χρησιμοποιηθούν για υλοποίηση των elliptic PDE solvers σε multicore CPU και GPU.

Σε αυτήν την έκθεση παρουσιάζουμε αρχικά τα αποτελέσματα της εκτέλεσης ενός προγράμματος επίλυσης Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (Partial Differential Equations, PDEs) με την χρήση τεχνικών Monte Carlo. Η υλοποίηση του προγράμματος επίλυσης των PDEs γίνεται σε μια πολυπύρηνη CPU και σε 4 GPUs χρησιμοποιώντας OpenCL [1].

Επίσης παρουσιάζουμε ένα καινοτόμο πλαίσιο το οποίο αυτοματοποιεί την διαχείριση δεδομένων (data management) από ένα σύστημα χρόνου εκτέλεσης (runtime system, RTS) σε ένα ετερογενές επεξεργαστικό σύστημα. Το πλαίσιο αυτό χρησιμοποιεί compile-time ανάλυση βασισμένη στο πολυεδρικό μοντέλο (polyhedral model) με σκοπό να συνδέσει υπολογισμούς με τα δεδομένα που αυτοί οι υπολογισμοί παράγουν και καταναλώνουν. Τα αποτελέσματα της πολυεδρικής ανάλυσης (polyhedral analysis) χρησιμοποιούνται στη συνέχεια από το RTS για αυτοματοποίηση της διαχείρισης δεδομένων. Πέρα από το ότι απαλλάσσει τον προγραμματιστή από το βάρος της διαχείρισης δεδομένων στις μνήμες διαφορετικών επεξεργαστών ανάλογα με την υπολογιστική τους ισχύ και το μέγεθος της μνήμης που περιέχουν.

Τα πειραματικά αποτελέσματα μας δείχνουν ότι το πλαίσιο αυτό διευκολύνει την χρήση όλων των ετερογενών πόρων (resources) του συστήματος με πολύ μικρή επιβάρυνση της τάξης του 1.24% σε σχέση με το να γίνει η κατανομή των δεδομένων από τον προγραμματιστή.

2. Υλοποίηση PDEs σε ετερογενές σύστημα CPU/GPU με την χρήση πολυεδρικού μοντέλου

2.1. Εισαγωγή

Τα ετερογενή συστήματα γίνονται ολοένα και πιο δημοφιλή στην υπολογιστική υψηλών επιδόσεων κυρίως λόγω της δυνατότητας τους να συνδυάζουν υψηλή ταχύτητα με σχετικά χαμηλή κατανάλωση ισχύος. Το σημαντικότερο πρόβλημα τους είναι ότι επιβαρύνουν τον προγραμματιστή όχι μόνο με την εύρεση και εκμετάλλευση του παραλληλισμού σε μια εφαρμογή αλλά επίσης και με την ευθύνη της μεταφοράς δεδομένων από τον χώρο διευθύνσεων ενός επεξεργαστή (πχ CPU) στον χώρο διευθύνσεων ενός διαφορετικού επεξεργαστή (πχ GPU). Ακόμα χειρότερα, η μεγάλη διαφοροποίηση μεταξύ αρχιτεκτονικών και μνημών στα ετερογενή συστήματα



αναγκάζουν πολλές φορές τον προγραμματιστή να δημιουργήσει πολλές διαφορετικές εκδοχές ενός κώδικα για να μπορέσει να καλύψει όλες τις περιπτώσεις.

Για να υλοποιήσουμε τον αλγόριθμο επίλυσης PDEs μέσω τεχνικών Monte Carlo, αποφασίσαμε να χρησιμοποιήσουμε το προγραμματιστικό μοντέλο OpenCL που στοχεύει ακριβώς τα ετερογενή συστήματα. Επιπλέον δημιουργούμε ένα πλαίσιο που συνδυάζει compile-time στατική ανάλυση με run-time δυναμική ανάλυση της ροής των δεδομένων μιας εφαρμογής για να αυτοματοποιήσει την διαχείριση δεδομένων σε ετερογενή συστήματα CPU και GPU. Πέρα από την αυτόματη διαχείριση δεδομένων, το πλαίσιο αυτό βοηθάει στην κατανομή των υπολογισμών στους υπάρχοντες επεξεργαστές λαμβάνοντας υπόψιν του την υπολογιστική ισχύ και το ενεργειακό αποτύπωμα κάθε επεξεργαστή, βελτιστοποιώντας κατά αυτόν τον τρόπο την χρήση της υπολογιστικής ισχύς και των μνημών του ετερογενούς συστήματος.

Η μεθοδολογία μας εισάγει μία αμελητέα επιβάρυνση στον χρόνο εκτέλεσης κατά 1.24% σε σχέση με την περίπτωση να γίνει η διαχείριση δεδομένων μόνο από τον επεξεργαστή. Στην συνέχεια της Παραγράφου 2, θα εισάγουμε βασικές έννοιες του πολυεδρικού μοντέλου στην Παρ. 2.2, θα περιγράψουμε την μεθοδολογία του πλαισίου μας στην Παρ. 2.3, και θα παρουσιάσουμε τα τελικά αποτελέσματα της μεθόδου μας στην Παρ. 0.

2.2. Πολυεδρικό Μοντέλο

Το πολυεδρικό μοντέλο είναι μαθηματικό πλαίσιο που χρησιμοποιείται κυρίως για ανάλυση βρόγχων (loops) για βελτιστοποίηση της μεταγλώττισης (compilation) σε ένα πρόγραμμα. Η μέθοδος του πολύεδρου θεωρεί ότι κάθε επανάληψη του loop (loop iteration) μπορεί να αναπαρασταθεί από ένα σημείο μέσα σε μαθηματικά αντικείμενα που ονομάζονται πολύεδρα (ή πολύτοπα). Μετασχηματισμοί που εφαρμόζονται πάνω σε πολύεδρα μεταφράζονται σε μετασχηματισμούς του πηγαίου κώδικα του προγράμματος μας. Η πολυεδρική ανάλυση αποτελεί ένα πολύτιμο εργαλείο για βελτιστοποίηση κώδικα μέσω του compiler λόγω της ευχέρειας να αλλάζει την μορφή των loops.

Ένα n-πολύεδρο είναι ένα γεωμετρικό αντικείμενο με επίπεδες πλευρές στον Nδιάστατο χώρο. Το πεδίο ορισμού D του πολυέδρου είναι η τομή ενός πεπερασμένου συνόλου από κλειστά ημίσεια διαστήματα (half spaces). Αυτή η αναπαράσταση μπορεί να γραφεί και ως ένα σύστημα από εξισώσεις και ανισώσεις:

$D: \{x \in Q^n | Ax = b, Cx \ge D\}$

Η ανάλυση με την μέθοδο του πολυέδρου αναπαριστά τα loops καθώς και τις εντολές μέσα στα loops ως πολύεδρα. Χρησιμοποιείται ευρέως σε δημοφιλής compilers όπως ο LLVM και ο gcc. Μέσω της δημιουργίας πολυέδρων, ένας compiler μπορεί να εντοπίσει εξαρτήσεις μεταξύ εντολών (data dependencies), να δημιουργήσει βελτιστοποιημένους χρονοπρογραμματισμούς εντολών (instruction schedules) και να ανακαλύψει παραλληλισμό μεταξύ εντολών ή επαναλήψεων ενός loop.



Παράδειγμα Ανάλυσης Πολυέδρου. Θα δείξουμε ένα απλό παράδειγμα ανάλυσης χρησιμοποιώντας την μέθοδο του πολυέδρου και αναφερόμενοι στον κώδικα της Εικόνα 1.

```
for (i=2; i <= min(M, -1+N+2), i++) {
    S1(i);
}</pre>
```

Εικόνα 1. Απλός κώδικας για το παράδειγμά μας.

Η συνθήκη που ελέγχει τον τερματισμό του loop αντιστοιχεί στον περιορισμό:

 $2 \le i \le \min(M, -1 + N + 2)$ ο οποίος μπορεί να γραφεί και ως:

 $2 \le i \le M$, kai $2 \le i \le N + 1$.

Ένα πολύεδρο μπορεί να αναπαρασταθεί από έναν πίνακα με (1+Output+Input+Parameters+1) στήλες και τόσες γραμμές όσος και ο αριθμός των περιορισμών που δημιουργούν το πολύεδρο. Η πρώτη στήλη δείχνει εάν η αντίστοιχη γραμμή περιγράφει ισότητα ή ανισότητα (τιμή 0 ή 1, αντίστοιχα). Τα Outputs αντιστοιχούν σε δείκτες πινάκων, και στο συγκεκριμένο παράδειγμα δείχνουν ότι το εύρος τιμών της μεταβλητής *i*, που είναι το μοναδικό output είναι η ίδια η τιμή του *i*. Η τρίτη στήλη αντιστοιχεί στον μοναδικό iterator i του loop, ενώ οι επόμενες δύο στήλες αντιστοιχούν στις παραμέτρους. Η τελευταία στήλη αποθηκεύει το σταθερό κομμάτι των περιορισμών. Ο πίνακας που αντιπροσωπεύει το πολύεδρο του κώδικά μας είναι ο παρακάτω:

/0	-1	1	0	0	0\
1	0	1	0	0	-2
1	0	-1	1	0	0
$\backslash 1$	0	-1	0	1	1/

2.3. Πλαίσιο ανάλυσης διαχείρισης δεδομένων

Σε αυτήν την παράγραφο θα εξηγήσουμε την μεθοδολογία εύρεσης του μεγέθους της μνήμης που απαιτεί ένας συγκεκριμένος υπολογισμός και τον τρόπο με τον οποίο μπορούμε να αυτοματοποιήσουμε μεταφορές δεδομένων σε μία ετερογενή πλατφόρμα. Αυτή η τεχνική μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για την παραλληλοποίηση ενός αλγορίθμου πιθανώς σε τμήματα διαφορετικού βαθμού διακριτότητας (granularity) από ότι αρχικά έχει καθορίσει ο προγραμματιστής.

Η πρώτη φάση της πολυεδρικής ανάλυσης λαμβάνει χώρα κατά την διάρκεια του compilation. Στοχεύει στο να δημιουργήσει μια σειρά από παραμετρικές εξισώσεις που να υπολογίζουν το διάστημα των θέσεων μνήμης που μπορούν να προσπελασθούν από κάθε κομμάτι του κώδικα. Κατά την διάρκεια εκτέλεσης του κώδικα, η δεύτερη φάση διαχωρίζει αυτόματα τα δεδομένα και τα μεταφέρει με έναν βέλτιστο τρόπο μεταξύ των επεξεργαστικών στοιχείων. Η Εικόνα 2 δείχνει την ροή και των δύο φάσεων του αλγορίθμου μας.







Εικόνα 2. Η ροή του υβριδικού αλγορίθμου μας

Στατική φάση (compilation).

Η ανάπτυξη της στατικής φάσης έγινε με την βοήθεια εργαλείων όπως το Polyhedral Extraction Tool (PET) [3], το ISL [2] και το PolyLib [4]. Το PET παίρνει σαν είσοδο τον πηγαίο κώδικα και δημιουργεί το πολυεδρικό μοντέλο για τα loops του κώδικα αυτού. Η ISL είναι μία βιβλιοθήκη εργαλείων για καλύτερη αναπαράσταση πολυέδρων, ενώ η PolyLib είναι μία βιβλιοθήκη που παρέχει εργαλεία για την επεξεργασία πολυέδρων.

Το αποτέλεσμα της πρώτης φάσης του αλγόριθμού μας είναι ένα σύνολο παραμετροποιημένων διαστημάτων για κάθε πίνακα (array) που προσπελαύνεται μέσα στο loop. Κάθε τέτοιο διάστημα περιέχει επίσης πληροφορίες για τον τύπο της προσπέλασης (read/write). Τα στάδια της φάσης αυτής που φαίνονται και στην Εικόνα 2 είναι τα εξής:

- Array index de-linearization. Η ανάλυση μας αφορά κάθε εντολή προγράμματος μέσα σε loops που προσπελαύνει μονοδιάστατους και δισδιάστατους πίνακες εφόσον οι προσπελάσεις είναι του τύπου array[row*width+column]. Λόγω της παρουσίας της παραμέτρου width, που αναπαριστά τον αριθμό των στηλών του πίνακα, το εργαλείο PET δεν μπορεί να ολοκληρώσει την ανάλυση επειδή θεωρεί ότι η αντίστοιχη προσπέλαση δεν είναι συσχετισμένη (affine). Αντιμετωπίζουμε αυτό το πρόβλημα με το να επεκτείνουμε το εργαλείο PET θεωρώντας τους δείκτες row και column σαν ανεξάρτητους δείκτες και το width σαν extra παράμετρο.
- 2. Inject initial dimensions and constraints. Ο κώδικας ενός παράλληλου πυρήνα (kernels) σε OpenCL ουσιαστικά περικλείεται από 6 loops, τα οποία αντιστοιχούν στην εκτέλεση ενός work-item της OpenCL μέσα σε ένα work-group (τα τρία εσωτερικά loops) και στην εκτέλεση ενός work-group μέσα σε ένα πλέγμα (grid) (τα τρία εξωτερικά loops). Σε αυτό το βήμα, εισάγουμε αυτά τα extra loops στο πολυεδρικό μας μοντέλο.



kernel void DoRandomWalks2D(
global float *D, global float *x, global float *result,
unsigned int num walks, float btol, unsigned int nodes)

- 3. Polyhedral minimization. Ελαχιστοποίηση του μεγέθους του πολυέδρου μέσω της απαλοιφής περιορισμών που είναι πλεονάζοντες.
- 4. Elimination of input dimensions. Το επόμενο βήμα της στατικής φάσης είναι η μείωση της διάστασης των εισόδων (inputs) του πολυέδρου. Πολλές είσοδοι έχουν σταθερή τιμή κατά την διάρκεια της εκτέλεσης του κώδικα (πχ η παράμετρος width) και οι προσπελάσεις της μνήμης λόγω αυτών των εισόδων μπορούν να υπολογισθούν κατά την διάρκεια του compilation. Μετά το τέλος της φάσης αυτής, όλα τα πολύεδρα αποτελούνται από στήλες που αντιστοιχούν σε outputs και παραμέτρους.
- 5. Code transformations and generation. Ο τελικός στόχος αυτής της φάσης είναι να χωρίσουμε τον αρχικό υπολογισμό σε μικρότερα κομμάτια και να καθορίσουμε για κάθε κομμάτι επακριβώς τα δεδομένα εισόδου και εξόδου που απαιτούνται για να εκτελεσθεί το κομμάτι αυτό. Αυτό απαιτεί το να ξαναγράψει το εργαλείο σε αυτήν την φάση τον αρχικό πηγαίο μας κώδικα.

Ο κώδικας της Εικόνας 3 και της Εικόνας 4 δείχνουν τον κώδικα Monte Carlo για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων (PDEs) πριν και μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου μας, αντίστοιχα. Με κόκκινο τονίζουμε τις αλλαγές όπου υπάρχουν.

Βασισμένος στην ανάλυση πολυέδρου, ο compiler δημιουργεί επίσης τον κώδικα για μία νέα συνάρτηση η οποία υπολογίζει τα διαστήματα της μνήμης που προσπελαύνονται από κάθε προσπέλαση μέσα στα κομμάτια του κώδικα που παράγονται σε αυτήν την φάση. Αυτή η συνάρτηση καλείται από το σ΄συστημα χρόνου εκτέλεσης (RTS) όταν κληθεί ο αντίστοιχος παράλληλος πυρήνας (kernel) προς εκτέλεση.



```
{
private long me = get local id(0), us = get local size(0);
private long group id x = get group id(0);
 /* Some variable declarations and statements omitted */
 if ( __group_id_x < nodes ) {</pre>
 x[0] = x[\_group\_id\_x*2];
  x[1] = x[\_group_id_x*2+1];
 for ( i=0; i<num_walks; ++i ) {</pre>
    x[0] = x[\_group\_id\_x*2];
    x[1] = x[\_group_id_x*2+1];
   perform_random_walks(num_walks, _x, _D);
 }
 barrier(CLK LOCAL MEM FENCE);
 if ( me == 0 ) {
   d = compose d();
   result[ group id x] = d;
 }
```

Εικόνα 3. Ο αρχικός κώδικας OpenCL για την μέθοδο Monte Carlo (MC).

```
/* ocl offsets: Holds the offset values (Dynamic mode) */
 kernel void DoRandomWalks2D( constant const int *ocl offsets,
 global float *D, global float *x, global float *result,
 unsigned int num walks, float btol, unsigned int nodes)
 private long me = get local id(0), us = get local size(0);
 private long group id x = get global id(0)/us;
 /* Some variable declarations and statements omitted */
 if ( group id x < nodes ) {</pre>
   x[0] = x[(\_group_id_x-x0y)*x0w -x0o];
   _x[1] = x[(__group_id_x-x1y)*x1w +1 -x1o];
   for ( i=0; i<num walks; ++i ) {</pre>
     x[0] = x[(\_group_id_x-x2y)*x2w -x2o];
     x[1] = x[(_group_id_x-x3y)*x3w +1 -x3o];
     perform random walks(num_walks, _x, _D);
   }
   barrier(CLK LOCAL MEM FENCE);
   if ( me == 0 ) {
   d = compose_d();
    result[__group_id_x -result20] = d;
   }
 }
```

Εικόνα 4. Ο κώδικας OpenCL για την μέθοδο Monte Carlo μετά την εφαρμογή του αλγορίθμου μας

Φάση χρόνου εκτέλεσης.

Αυτή η φάση λαμβάνει χώρα κατά την εκτέλεση του κώδικα λίγο πριν το



compilation του πυρήνα OpenCL που πρόκειται να εκτελεσθεί (σημ. στην OpenCL, οι πυρήνες είναι δυνατόν να γίνονται compile κατά την διάρκεια εκτέλεσης). Η συνάρτηση που παράγεται στο τέλος της προηγούμενης φάσης εκτελείται σε αυτήν την φάση με σκοπό να δημιουργήσει τις προσπελάσεις για κάθε συσκευή OpenCL. Τα στάδια της φάσης αυτής που φαίνονται και στην Εικόνα 2β είναι τα εξής:

- Coalescing of overlapping/adjacent SBs. Επιμέρους περιοχές της μνήμης που προσπελαύνονται από κάθε κομμάτι του πυρήνα OpenCL συνενώνονται για να δημιουργήσουν μία μεγαλύτερη περιοχή με σκοπό να μειωθεί ο αριθμός των μεταφορών δεδομένων μεταξύ Host και των υπόλοιπων συσκευών (CPU ή GPU).
- Allocation of memory buffers. Μετά την φάση της συνένωσης των επιμέρους τμημάτων μνήμης, γίνεται δυναμική δέσμευση ανάλογης ποσότητας μνήμης σε κάθε επεξεργαστικό στοιχείο (CPU ή GPU) που είναι στο σύστημα μας.
- 3. Memory buffer transfer to devices. Η μεταφορά δεδομένων μεταξύ του Host και των υπόλοιπων συσκευών γίνεται μόνο την πρώτη φορά ή όταν καινούργια δεδομένα έχουν δημιουργηθεί στις θέσεις μνήμης και θα πρέπει να μεταφερθούν και αυτά.

2.4. Αποτελέσματα της μεθόδου για PDEs

Ο αλγόριθμος για υλοποίηση των elliptic PDE solvers είναι ένας εναλλακτικός τρόπος επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων (multi-domain, multiphysics). Ο βασικός παράλληλος πυρήνας (kernel) του αλγορίθμου αυτού (Εικόνα 3) πραγματοποιεί τυχαίους περιπάτους (random walks) από το σύνορο (boundary) ενός υπόχωρου (sub-domain) στο σύνορο του μεγαλύτερου χώρου (domain). Ο σκοπός του περιπάτου είναι ο υπολογισμός των αρχικών συνθηκών του υπόχωρου για την επίλυση των διαφορικών εξισώσεων.

Μετά από ανάλυση και profiling της εφαρμογής μέσω της σουίτας Intel(TM) Vtune αναγνωρίσαμε δύο κρίσιμα σημεία της εφαρμογής, που καταναλώνουν σχεδόν πλήρως το χρόνο εκτέλεσης της εφαρμογής. Η πρώτη μέθοδος ονομάζεται *monte_carlo* και είναι η συνάρτηση υπεύθυνη για την παραγωγή τυχαίων μονοπατιών. Το αμέσως επόμενο πιο χρονοβόρο τμήμα της εφαρμογής είναι η επίλυση συστημάτων μέσω της μεθόδου *conjugate gradient* η οποία είναι υλοποιημένη στην βιβλιοθήκη *deal.II*. Αρχικά επιλέξαμε να επικεντρωθούμε στην συνάρτηση *monte_carlo* μιας και αυτή αποτελεί ουσιαστικά την ουσία της εφαρμογής.

Πριν παρουσιάσουμε τον λόγο επιτάχυνσης μέσω της χρήσης OpenCL Kernels βρίσκουμε σκόπιμο να αναφέρουμε τα χαρακτηριστικά που έχει η πλατφόρμα πάνω στην οποία εκτελέσαμε τις διαφορετικές εκδόσεις της εφαρμογής.

Για την πειραματική μελέτη απόδοσης χρησιμοποιήσαμε τα εξής δύο υπολογιστικά κυκλώματα:

• Επεξεργαστής γενικού σκοπού: Intel(R) Core(TM) i7 CPU 870 (2.93GHz)



• Κάρτα γραφικών: GeForce GTX 480 (1401MHz)

Για τα πειράματα που εκτελούνται στον Intel επεξεργαστή (αρχική έκδοση του κώδικα) χρησιμοποιούμε 8 νήματα ενώ για την εκτέλεση στην κάρτα γραφικών χρησιμοποιούμε N*768 νήματα όπου N ο αριθμός των σημείων στα οποία θα εφαρμοστεί η μέθοδος *monte_carlo*. Επειδή η συνολική επιτάχυνση του προγράμματος διαμορφώνεται σε σχέση με το μέγεθος του προβλήματος που τίθεται για επίλυση παρουσιάζουμε μερικές ενδεικτικές εκτελέσεις στον παρακάτω πίνακα:

Χρόνος εκτέλεσης CPU (Διάσταση Χώρου)	Χρόνος εκτέλεσης GPU / Χρονοβελτίωση	Μέσο σφάλμα CPU	Μέσο Σφάλμα GPU
100 secs (2D)	34 secs / 2.94 x	0.0002041409246	8.811696406e- 05
241 secs (3D)	35 secs / 6.89x	0.01288890583	0.01290900319
761 secs (2D)	85 secs / 8.95x	0.0002024040681	2.788477219e- 05
2026 secs (3D)	2004 secs / 1x	0.009886439747	0.009778896185

Επιλέξαμε τυχαία 4 παραδείγματα για να παρουσιάσουμε την βελτιστοποίηση στη μέθοδο μας. Το γεγονός ότι η GPU φαίνεται να παράγει ορθότερες εκτιμήσεις είναι τυχαίο, σε γενικές γραμμές οι εκτιμήσεις των δύο υλοποιήσεων έχουν παραπλήσιες τιμές. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η αυξομείωση της χρονοβελτίωσης, με αποκορύφωμα το τελευταίο από τα 4 παραδείγματα. Αν και δεν οδήγησε σε ουσιαστική διαφορά στο συνολικό χρόνο εκτέλεσης, η συνάρτηση που επιλέξαμε να επιταχύνουμε είχε χρονοβελτίωση **10.67x** όμως η διάρκεια εκτέλεσής της ήταν 32 και 3 δευτερόλεπτα σε επεξεργαστή και κάρτα γραφικών, αντίστοιχα. Αυτό είναι ένδειξη πως μπορούμε να λάβουμε περαιτέρω χρονοβελτίωση με την βελτιστοποίηση της συνάρτησης που επιλύει τα συστήματα που προκύπτουν (μέθοδος conjugate gradient) μετά τη διαδικασία εκτίμησης (monte_carlo).

Μέσο σφάλμα

Η επιταχυμένη υλοποίηση τείνει να παράγει καλύτερες προσεγγίσεις, δηλαδή με μικρότερο μέσο σφάλμα. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι τα βάρη των μονοπατιών αθροίζονται χρησιμοποιώντας 768 double precision floating point αριθμούς. Η αρχική υλοποίηση χρησιμοποιούσε 1 τέτοια μεταβλητή. Λόγω της φύσης των floating point αριθμών όταν προστίθενται μεταξύ τους αριθμοί εισάγεται ένα σφάλμα στο τελικό αποτέλεσμα, το οποίο μεγαλώνει όσο μεγαλώνει η απόσταση των μονοπατιών είναι λιγότερο πιθανό να προστεθούν αριθμοί πολύ διαφορετικοί σε σχέση με την πρώτη υλοποίηση που ήταν "απόλυτα σίγουρο" μιας και υπήρχε μόνο 1 μεταβλητή στην



οποία γινόταν όλο το άθροισμα για ένα σημείο.

Μεθοδολογία

Οι αλλαγές που κάναμε έγιναν με τέτοιο τρόπο ώστε ο τρόπος υπολογισμού της μεθόδου *monte_carlo* να επιλέγεται κατά την εκτέλεση της εφαρμογής. Αυτό μας οδήγησε αρχικά στην αλλαγή του τρόπου δέσμευσης μνήμης για την αποθήκευση των δεδομένων εισόδου της συνάρτησης. Από μία λίστα με λίστες μεταβλητών double precision καταλήξαμε πάλι σε μία δισδιάστατη δομή της οποίας όμως τα στοιχεία είναι αποθηκευμένα σε διαδοχικές θέσεις μνήμης. Έτσι δεν χρειάστηκαν να γίνουν αλλαγές στον αρχικό κώδικα ενώ η μεταφορά δεδομένων προς την GPU έγινε στη συνέχεια με πολύ απλό τρόπο.

Το επόμενο βήμα ήταν να δημιουργηθεί μία απλή υλοποίηση του πυρήνα της *monte_carlo*, δηλαδή ο υπολογισμός ενός μόνο μονοπατιού, σε γλώσσα C ώστε να μην έχουμε τα overheads της C++ και να μπορεί να γίνει απεσφαλμάτωση γρήγορα και εύκολα πριν καν γίνει η τελική υλοποίηση στην κάρτα γραφικών. Σε αυτό το σημείο εντοπίσαμε πως υπήρχε μια βοηθητική συνάρτηση η οποία καλείται πολλές φορές και έκανε χρήση τεσσάρων if-statements ώστε να υπολογίσει την ελάχιστη τιμή τεσσάρων παραστάσεων. Κάναμε μερικές αλλαγές στον κώδικα ώστε να μειώσουμε τους ελέγχους έχοντας ως σκοπό να καταλήξουμε σε γρηγορότερη εκτέλεση, δυστυχώς όμως η επιτάχυνση λόγω αυτής της βελτιστοποίησης ήταν μηδαμινή και στις δύο υπολογιστικές μονάδες.

Η OpenCL υλοποίηση χρησιμοποιεί πολλαπλά νήματα για τον υπολογισμό της τιμής σε ένα σημείο. Αυτό γίνεται αναθέτοντας σε καθένα από αυτά ένα κλάσμα του συνολικού αριθμού μονοπατιών που πρέπει να "περπατηθούν" ώστε να προκύψει η εκτιμώμενη τιμή του σημείου. Ενδεικτικά αναφέρουμε πως η τρέχουσα υλοποίηση όταν εκτελείται σε μία GeForce GTX 480 χρησιμοποιεί **768** τέτοια νήματα για τον υπολογισμό κάθε σημείου, όταν ο χώρος έχει 2 διαστάσεις.

Αφού επιβεβαιώσαμε την ορθότητα του κώδικα εκτελώντας πολλαπλά πειράματα και έχοντας τις ίδιες τιμές που προκύπτουν από την αρχική υλοποίηση συνεχίσαμε με το σχεδιασμό του OpenCL Kernel. Αυτή τη φορά όμως λόγω αύξησης στον αριθμό των καταχωρητών που χρησιμοποιούνται από τον OpenCL Kernel για τα μονοπάτια σε 3D χώρο τα νήματα που χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση ενός σημείου μειώθηκαν στα **576**.

Τέλος και στους 2 kernels χρησιμοποιήσαμε τις native υλοποιήσεις των συναρτήσεων cos/log/sin σε σημεία που δεν επηρεάζουν την ακρίβεια της εκτίμησης, μιας και εφαρμόζονται σε δεδομένα τα οποία παράγονται με ψευδοτυχαίο τρόπο. Έτσι η μείωση της ακρίβειας που υπεισέρχεται λόγω των native υλοποιήσεων εμφανίζεται ουσιαστικά ως επιπλέον τυχαιότητα, μάλιστα παρατηρήσαμε ότι σε πολλές περιπτώσεις η ακρίβεια των εκτιμήσεων βελτιώνεται.



3. Βιβλιογραφία

[PCI] V. Vassiliadis, C.D. Antonopoulos, G. Zindros. Automating data management in heterogeneous systems using polyhedral analysis. *Proceedings of the 19th Panhellenic Conference on Informatics (PCI 2015)*. Pages 317-322. October 2015. Athens, Greece.

[ISL] S. Verdoolaege. ISL: An integer set library for the polyhedral model. In Mathematical Software (ICMS 2010), pages 299-302. Springer, 2010.

[PET] S. Verdoolaege and T. Grosser. Polyhedral extraction tool. In Proceedings of Second International Workshop on Polyhedral Compilation Techniques (IMPACT'12), 2012.

[PolyLib] D. K. Wilde. A library for doing polyhedral operations. Parallel Algorithms and Application, 15(3-4):137-166, 2000.



Παράρτημα Ζ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 4.1

Συγκερασμός αριθμητικών μεθόδων και λογισμικού



Περιεχόμενα

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



1 Σκοπός

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

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

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

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

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

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

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





Εικόνα 1: Συνολική αρχιτεκτονική ΜΑΤΕΝVMED

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής: Στην παράγραφο 2 παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία της μεθοδολογίας που ακολουθήσαμε και στην παράγραφο 3 τα σημαντικότερα πειραματικά αποτελέσματα. Στην παράγραφο 4 αναφερόμαστε στα παραδοτέα που παρήχθησαν στα πλαίσια της δράσης. Στην παράγραφο 5 περιγράφουμε τις συνεργασίες που αναπτύχθηκαν, ενώ η παράγραφος 6 ολοκληρώνει την έκθεση με τη συζήτηση πιθανών επεκτάσεων της υποδομής που παράχθηκε στα πλαίσια της δράσης.

2 Μεθοδολογία

2.1 Επιλογή βασικού Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ)

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

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



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

Το πακέτο FEniCS [10] βρέθηκε να ικανοποιεί κατά τον καλύτερο τρόπο όλα τα παραπάνω κριτήρια. Αποτελεί συλλογή ελεύθερων εργαλείων λογισμικού εξειδικευμένων στην αυτόματη και αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Η παράγραφος αυτή προσφέρει μια σύντομη επισκόπηση των τμημάτων του FEniCS που έχουν ενδιαφέρον στα πλαίσια του έργου. Λεπτομερέστερη περιγραφή μπορεί να βρεθεί στο βιβλίο του FEniCS [10] το οποίο είναι διαθέσιμο ελεύθερα στο βασικό ιστότοπο¹ του FEniCS.

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

- **Dolfin [11]:** Η βασική διεπαφή χρήστη. Αποκρύπτει τις λεπτομέρειες υλοποίησης των επιμέρους στοιχείων του FEniCS και προσφέρει ένα πλήρες ΑΡΙ στον χρήστη, επιτρέποντάς του να αξιοποιήσει όλες τις υπηρεσίες της πλατφόρμας.
- UFL [3]: Η Unified Form Language είναι η σημειογραφία έκφρασης των PDEs που προσφέρει η διεπαφή χρήστη. Η σημειογραφία αυτή βρίσκεται πολύ κοντά στη μαθηματική σημειογραφία (περισσότερες λεπτομέρειες για τη UFL θα συζητηθούν στην παράγραφο 2.1.3).
- Πλήθος χώρων πεπερασμένων στοιχείων ώστε ο χρήστης να επιλέξει το κατάλληλο για το εκάστοτε πρόβλημα, τόσο για 2D, όσο και για 3D χωρία.
- Πλήθος πακέτων γραμμικής άλγεβρας που υποστηρίζουν διαφορετικές οικογένειες επιλυτών. Τα περισσότερα είναι παραμετροποιήσιμα από το χρήστη.

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

¹http://fenicsproject.org/book/index.html#book





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

2.1.1 Η βιβλιοθήκη Dolfin

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

2.1.2 Πεπερασμένα Στοιχεία και Πλέγματα

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

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



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

Πίνακας 1: Πεπερασμένα στοιχεία που υποστηρίζονται στο Dolfin 1.4.



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

2.1.3 H Unified Form Language (UFL)

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

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



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

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

$$\underbrace{\int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x}_{a(u,v)} = \underbrace{\int_{\Omega} fv \, \mathrm{d}x}_{L(v)} \quad \forall v \in V.$$

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

Κώδικας 1: Ορισμός PDE σε σημειογραφία FEniCS UFL

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

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

Κώδικας 2: Επίλυση PDE σε FEniCS UFL

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

2.1.4 Αξιοποίηση Λογισμικού Αιχμής στο Επίπεδο της Γραμμικής Άλγεβρας

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

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



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

2.2.1 Αξιοποίηση Ετερογενών Συστημάτων και Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης

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

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

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

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

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



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

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

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

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

from dolfin import *

parameters["use_whale_backend"] = True

rest of the code

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



3 Πειραματικά Αποτελέσματα

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

3.1.1 Εγκατάσταση FEniCS σε Cluster & Cloud

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

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

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

4 Παραδοτέα

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

Τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

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



	KEO 1	KEO 2	KEO 3
Προδιαγραφές ΠΕΠ	X	Х	х
Απαιτήσεις για υποστήριξη προβλημάτων MDMP	Х	Х	Х
Υποδομή Υποστήριξης GPUs/FPGAs/Flash Storage		Х	

Πίνακας 2: Συνεργασίες στα πλαίσια της Δράσης 4.1.

5 Συνεργασίες

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

6 Μελλοντικές Δράσεις

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

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

Αναφορές

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



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



Παράρτημα Η΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 4.2

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Ιατρικής



Περιεχόμενα

1	Σκο	πός	3
	1.1	DIRK και SSP Runge-Kutta Σχήματα Δακριτοποίησης Χρόνου .	3
	1.2	Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γενικευμένα γραμμικά προβλή- ματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις	4
	1.3	Επικύρωση αποτελεσμάτων σε ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις διαστάσεις	4
	1.4	Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+2$ διαστάσεις.	4
2	Μεθ 2.1 2.2	οδολογία DIRK και SSP Runge-Kutta Σχήματα Δακριτοποίησης Χρόνου.. Μαθηματικό Μοντέλο σε Ν περιοχές	5 5 6
3	Απα	στελέσματα	8
	3.1	Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γενικευμένα γραμμικά προβλή- ματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις	8 8 11
	3.2	Επικύρωση αποτελεσμάτων σε ομογενή παραβολικά μη-γραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις διαστάσει	12 13 15
	3.3	Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+2$ διαστάσεις	17
4	Παρ	αδοτέα	18
5	Συν	εργασίες	18
6	Μελ	λοντικές Δράσεις	18



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 2013) σε γενικευμένα (με ακαθόριστου πλήθους περιοχών ασυνέχειας και αρχικών πηγών) γραμμικά προβλήματα διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο στις 1 + 1 αλλά και στις 1 + 2 διαστάσεις όπου παράλληλα επαληθεύσαμε την τέταρτη τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC. Προς τούτο η dDHC μέθοδος συνδυάστηκε με ένα Diagonally Implicit Runge-Kutta σχήμα διακριτοποίησης χρόνου τρίτης τάξεως. Παράλληλα, εφαρμόσαμε τη Hermite-Collocation, με φορμαλισμό Hadamard που αναπτύξαμε στη Δράση 2.1 για μη-γραμμικά παραβολικά προβλήματα σε ομοιογενή περιβάλλοντα, σε γενικευμένα προβλήματα βιολογικής εισβολής τύπου Fisher και KPP. Τα Runge-Kutta σχήματα διακριτοποίησης χρόνου που χρησιμοποιήσαμε για αυτήν την κατηγορία προβλημάτων ανήκουν στην κλάση Strong Stability Preserving (SSP) τριών και τεσσάρων βημάτων τρίτης τάξεως.

Επιπλέον, την περίοδο αυτή συνεχίστηκε η πειραματική επεξεργασία δεδομένων και η πραγματοποίηση ενδεικτικών προσομοιώσεων με την πλατφόρμα πεπερασμένων στοιχείων FEniCS στα υπολογιστικά συστήματα του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Η/Υ (ΕΕΜΗΥ). Ταυτόχρονα επεκτείνεται η μελέτη απεικόνισης μεθόδων Hermite-Collocation σε πολυπυρήνες παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές τύπου CPU/GPU (η περιγραφή των σχετικών αποτελεσμάτων έχει συμπεριληφθεί στη ΤΕ Δράσης 4.3 έτους 2013).

Στις επόμενες παραγράφους συνοψίζονται τα αποτελέσματα εφαρμογών της τρέχουσας περιόδου.

1.1 DIRK και SSP Runge-Kutta Σχήματα Δακριτοποίησης Χρόνου

Για την αποτελεσματικότερη συμπεριφορά της της μεθόδου dDHC είναι απαραίτητη η ζεύξη της με κατάλληλο αριθμητικό σχήμα χρονικής διακριτοποίησης ικανό να διατηρεί την συνολική τάξη σύγκλισης της μεθόδου σε γραμμικά και μη-γραμμικά μοντέλα διάχυσης καρκινικού όγκου αλλά και σε προβλήματα με άκαμπτη λύση. Σκοπός της ενότητας αυτής είναι να περιγράψουμε με συντομία σχήματα Runge-Kutta διακριτοποίησης χρόνου τύπου Diagonally Implicit και Strong Stability Preserving (SSP) και να εξηγήσουμε την καταλληλότητα χρήσης



τους σε διαφορετικές κλάσεις προβλημάτων ώστε να εξυπηρετείται αφενός μεν ο πρωταρχικός μας στόχος της αποτελεσματικής ζεύξης με μεθόδους Collocation αφετέρου δε τα παραγόμενα συστήματα αλγεβρικών εξισώσεων να διατηρούν περιορισμένη πολυπλοκότητα ώστε να μπορούν να επιλυθούν γρήγορα και αποδοτικά.

1.2 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι η μελέτη συμπεριφοράς της σύζευξης σχημάτων Runge-Kutta, τύπου Diagonally Implicit, και μεθόδων dDHC, καθώς και μετασχηματισμού Φωκά, σε γενικευμένα μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+1 διαστάσεις που περιγράφονται από αντίστοιχα γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.

1.3 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε ομογενή παραβολικά μηγραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις διαστάσεις

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι η μελέτη συμπεριφοράς των μεθόδων Hermite-Collocation και SSPRK για μη-γραμμικά ομοιογενή παραβολικά προβλήματα, που αναπτύχθηκαν και περιγράφονται στη ΤΕ της Δράσης 2.1 έτους 2013, σε προβλήματα Βιολογικής εισβολής πληθυσμών στις 1 + 1 διαστάσεις.

1.4 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+2 διαστάσεις.

Σκοπός της ενότητας αυτής είναι η μελέτη συμπεριφοράς των μεθόδων dDHC και σχημάτων DIRK σε μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 1+2 διαστάσεις που περιγράφονται από αντίστοιχα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων.

Το υπόλοιπο της παρούσης Τεχνικής Έκθεσης είναι οργανωμένο ως εξής. Στην παράγραφο 2 περιγράφονται σχήματα Runge-Kutta καθώς και τα το γενικό μοντέλο εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου, στην παράγραφο 3 ενδεικτικά αριθμητικά αποτελέσματα, ενώ στις επόμενες παραγράγους περιγράφονται συνεργασίες που αναπτύχθηκαν καθώς και τους μελλοντικούς στόχους.



2 Μεθοδολογία

Για την εφαρμογή των αριθμητικών μεθόδων dDHC και τον συνδυασμό τους με διάφορα σχήματα χρονικής διακριτοποίησης χρησιμοποιήθηκαν εξισώσειςμοντέλα που κυρίως προσομοιώνουν, την ανάπτυξη καρκινικού όγκου στον εγκέφαλο και την βιολογική εισβολή πληθυσμού σε ομοιογενές και ανομοιογενές περιβάλλον.

2.1 DIRK και SSP Runge-Kutta Σχήματα Δακριτοποίησης Χρόνου

Ας θεωρήσουμε ότι έχουμε ένα σύστημα Συνήθων Διαφορικών Εξισώσεων (ΣΔΕ) της μορφής:

$$C^{(0)}\dot{\boldsymbol{a}} = L(\boldsymbol{a}). \tag{1}$$

Θεωρώντας ότι ο πίνακας $C^{(0)}$ είναι αντιστρέψιμος τότε το σύστημα θα μπορούσε επίσης να γραφεί ως:

$$\dot{\boldsymbol{a}} = \tilde{L}(\boldsymbol{a}) \doteq \left(C^{(0)}\right)^{-1} L(\boldsymbol{a}) \tag{2}$$

Όπως είναι γνωστό, η βασική ιδέα των μεθόδων Runge-Kutta είναι η προσέγγιση της λύσης απο το βήμα $a^{(n)}$ στο χρονικό βήμα $a^{(n+1)}$ χρησιμοποιώντας τον τύπο q ενδιάμεσων βημάτων:

$$a^{(n+1)} = a^{(n)} + \Delta t \sum_{i=1}^{q} b_i \tilde{L}(a^{(n,i)})$$
 (3)

με **a**⁽⁰⁾ να είναι η αρχική συνθήκη του συστήματος και b_i συντελεστές βαρύτητας των μεθόδων RK. Η χρήση αριθμητικών σχημάτων υψηλής τάξης που να διατηρούν την ευστάθεια του συστήματος απεδείχθη απαραίτητη, ιδιαιτέρως σε μη-γραμμικά προβλήματα και σε προβλήματα με άκαμπτη λύση.

Στη κατεύθυνση αυτή, μελετήσαμε καταρχήν την χρήση της Διαγώνιας Πεπλεγμένης Runge-Kutta (Diagonally Implicit RK - DIRK) τρίτης τάξης, η οποία αποδείχθηκε κατάλληλη για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 και στις 1+2 διαστάσεις καθώς και σε προβλήματα που έχουν άκαμπτη λύση. Για το σύστημα (2) η μέθοδος DIRK μπορεί να γραφεί ως:

DIRK(2,3)

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(1)} &= \mathbf{a}^n + \lambda \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) \\ \mathbf{a}^{(2)} &= \mathbf{a}^n + \Delta t \left[(1 - 2\lambda) \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \lambda \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) \right] \\ \mathbf{a}^{n+1} &= \mathbf{a}^n + \frac{\Delta t}{2} \left[\tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) + \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) \right] \end{aligned}$$



Η εφαρμογή της μεθόδου DIRK σε μη γραμμικά συστήματα ΣΔΕ κρίθηκε μη αποδοτική λόγω του υψηλού υπολογιστικού κόστους ανά χρονικό βήμα. Συγκεκριμένα, η πεπλεγμένη δομή της μεθόδου δημιουργεί μη γραμμικούς αγνώστους, με συνέπεια, η προσέγγιση της λύσης σε κάθε χρονικό βήμα να προϋποθέτει τη λύση δύο μη γραμμικών συστημάτων. Ως εναλλακτικά επιλογή θεωρήσαμε τα σχήματα Strong Stability Preserving RK (SSPRK) τριών και τεσσάρων βημάτων, που έχουν αναπτυχθεί για την επίλυση μη γραμμικών συστημάτων ΣΔΕ. Οι κανόνες SSPRK τριών και τεσσάρων βημάτων έχουν αντίστοιχα τη μορφή:

SSP(3,3)

$$\mathbf{a}^{(1)} = \mathbf{a}^{n} + \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{n})$$

$$\mathbf{a}^{(2)} = \frac{3}{4}\mathbf{a}^{n} + \frac{1}{4}\mathbf{a}^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)})$$

$$\mathbf{a}^{n+1} = \frac{1}{3}\mathbf{a}^{n} + \frac{2}{3}\mathbf{a}^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)})$$

SSP(4,3)

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(1)} &= \mathbf{a}^{n} + \frac{1}{2} \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{n}) \\ \mathbf{a}^{(2)} &= \mathbf{a}^{(1)} + \frac{1}{2} \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(1)}) \\ \mathbf{a}^{(3)} &= \frac{2}{3} \mathbf{a}^{n} + \frac{1}{3} \mathbf{a}^{(2)} + \frac{1}{6} \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(2)}) \\ \mathbf{a}^{n+1} &= \mathbf{a}^{(3)} + \frac{1}{2} \Delta t \tilde{L}(\mathbf{a}^{(3)}) \end{aligned}$$

2.2 Μαθηματικό Μοντέλο σε Ν περιοχές

Η βασική ΜΔΕ που περιγράφει το γραμμικό μοντέλο διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο έχει τη μορφή:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot \left(\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) \nabla \bar{c} \right) + \rho \bar{c} \quad , \tag{4}$$

όπου $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})$ συμβολίζει τη συγκέντρωση κυττάρων στη θέση \bar{x} την χρονική στιγμή \bar{t} , το ρ συμβολίζει το ποσοστό της αύξησης της συγκέντρωσης των κυττάρων,



και συμπεριλαμβάνει τόσο το ρυθμό αναπαραγωγής όσο και εκείνον της καταστροφής τους, και $\bar{D}(\bar{\mathbf{x}})$ είναι ο συντελεστής διάχυσης των κυττάρων στον ιστό του εγκεφάλου και δίδεται από την σχέση

$$\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} D_g & , \ \bar{\mathbf{x}} \ \alpha \nu \eta \kappa \epsilon i \ \sigma \tau \eta \nu \ \phi \alpha i \dot{\alpha} \ o \upsilon \sigma i \alpha \\ D_w & , \ \bar{\mathbf{x}} \ \alpha \nu \eta \kappa \epsilon i \ \sigma \tau \eta \nu \ \lambda \epsilon \upsilon \kappa \eta \ o \upsilon \sigma i \alpha \end{cases},$$
(5)

με D_g και D_w να είναι σταθερές με $D_w > D_g$. Το μοντέλο ολοκληρώνεται με μηδενικές συνοριακές συνθήκες ροής που υποδηλώνουν τη μη επέκταση των καρκινικών κυττάρων εκτός της περιοχής του εγκεφάλου, καθώς και μία αρχική συνθήκη $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, 0) = \bar{f}(\bar{\mathbf{x}})$, όπου $\bar{f}(\bar{x})$ δείχνει την αρχική χωρική κατανομή των κακοήθων κυττάρων.

Χρησιμοποιώντας τον κλασικό εκθετικό μετασχηματισμό $c(x,t) = e^t u(x,t)$ και τις αδιάστατες μεταβλητές (βλ. [27]):

$$x = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \quad , \quad t = \rho \bar{t} \quad , \tag{6}$$

$$c(x,t) = \bar{c} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{x} \rho \bar{t} \right) \frac{D_w}{\rho N_0} \quad , \tag{7}$$

$$f(x) = \bar{f}\left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}}\bar{x}\right) \quad , \quad N_0 = \int \overline{f}(\bar{x})d\bar{x} \tag{8}$$

καταλήγουμε στην παρακάτω μορφή του μοντέλου:

$$\begin{cases}
 u_t = \nabla \cdot (D\nabla u), & x \in [a, b], & t \ge 0 \\
 u_x(a, t) = 0, & u_x(b, t) = 0 \\
 u(x, 0) = f(x) := \sum_{i=1}^M \delta(x - \xi_i), & \xi_i \in (a, b)
\end{cases},$$
(9)

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

Λαμβάνοντας υπ΄όψιν την ετερογένεια του εγκεφαλικού ιστού (λευκή - φαιά ουσία), θεωρούμε ότι το διάστημα [a, b] είναι χωρισμένο σε n + 1 περιοχές $R_j := (w_{j-1}, w_j)$, με $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < \ldots < w_n < w_{n+1} \equiv b$, και εάν, για κάποιο j, η R_j είναι η λευκή περιοχή, τότε η R_{j-1} και R_{j+1} θα είναι η φαιά περιοχή. Συνεπώς η αδιάστατη μορφή του συντελεστή διάχυσης D(x) γίνεται:

$$D(x) = \gamma_j , \ x \in R_j , \ j = 1, \dots, n+1$$
 (10)

με

$$\gamma_j := \begin{cases} D_g/D_w, & \text{\acute{o}tav } \eta \ R_j \ \text{\acute{e}tval } \eta \ \phi \text{al\acute{a} oudía} \\ 1, & \text{when } R_j \ \text{\acute{e}tval } \lambda \text{euk\acute{\eta} oudía} \end{cases}$$
(11)



3 Αποτελέσματα

3.1 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γενικευμένα γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 1 διαστάσεις

3.1.1 Μεθοδος dDHC και σχήματα DIRK

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

Πρόβλημα 1 (4 περιοχές - 1 πηγή κυττάρων)

$$a = -5, w_1 = -2.5, w_2 = 0, w_3 = 2.5, b = 5, \gamma = 0.5$$

Kai $f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}}e^{-(x-1)^2/\eta^2}$, µε $\eta = 0.2$.

Η εξέλιξη του καρκινικού όγκου στο χρόνο για μέγιστο χρόνο $t_{max} = 4$, που αντιστοιχεί σε πραγματικό χρόνο περίπου ενός έτους, απεικονίζεται σχηματικά από το σχήμα (1) που ακολουθεί. Η τάξη σύγκλισης της collocation μεθόδου (DHC)





με ασυνεχή πολυώνυμα Hemite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με όλες τις μεθόδους χρονικής διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα (2) διατηρείται τετάρτης τάξεως. Αντίστοιχα η τάξη σύγκλισης των χρονικών μεθόδων διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήματα (3) παρέμεινε ένα για την BE, δύο CN και





Σχήμα 2: Τάξη σύγκλισης της χωρικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 1.

τρία για την DIRK. Το N_t συμβολίζει το πλήθος των χρονικών βημάτων μεταξύ του t = 0 και του t = 4.





Πρόβλημα 2 (5 περιοχές -2 πηγές)

$$a = -10, \ w_1 = -6, \ w_2 = -2, \ , \ w_3 = 2, \ w_4 = 6, \ b = 10, \ \gamma = 0.5$$

Kai $f(x) = \frac{1}{\eta\sqrt{\pi}}(e^{-(x+8)^2/\eta^2} + e^{-(x+4)^2/\eta^2}) \ ,$ me $\eta = 0.2.$



Όπως και στο πρόβλημα 1, η εξέλιξη του καρκινικού όγκου στο χρόνο για μέγιστο χρόνο $t_{max} = 4$, που αντιστοιχεί σε πραγματικό χρόνο περίπου ενός έτους, απεικονίζεται σχηματικά από το σχήμα (4) που ακολουθεί.



Σχήμα 4: Εξέλιξη της συγκέντρωσης καρκινικών κυττάρων στο χρόνο

Η τάξη σύγκλισης της collocation μεθόδου (DHC) με ασυνεχή πολυώνυμα Hemite στα σημεία διεπαφής σε συνδυασμό με όλες τις μεθόδους χρονικής διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα (5) διατηρείται και πάλι τετάρτης τάξεως



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

Αντίστοιχα η τάξη σύγκλισης των χρονικών μεθόδων διακριτοποίησης, όπως φαίνεται στο σχήμα (6), 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.





Σχήμα 6: Τάξη σύγκλισης της χρονικής διακριτοποίησης όλων των μεθόδων για το Πρόβλημα 2.

3.1.2 Μέθοδος Φωκά

Για τα αριθμητικά μας πειράματα χρησιμοποιήσαμε [a,b] = [-4,5] για τα άκρα, $[w_1, w_2, w_3, w_4, w_5] = [-2, -1.5, 0, 3, 4]$ για τα σημεία διεπαφής των περιοχών, $\gamma_j = D_g/D_w$ is 0.2 για όλα τα $j = 1, 3, \ldots, n + 1$ και δύο πηγές καρκινικών κυττάρων με $\xi_1 = -3$ και $\xi_2 = 2.5$.

Στο γράφημα 7 παρουσιάζεται η διάχυση του καρκινικού όγκου σε διάφορα χρονικά βήματα.



Σχήμα 7: Χρονική εξέλιξη του πυκνότητας του όγκου c(x,t).

Το σχετικό σφάλμα, που απεικονίζεται στο γράφημα 8, δίνεται από τη σχέση:


$E_N := \|u_{N_{i+1}} - u_{N_i\|_{\infty}} / \|u_{N_{i+1}}\|_{\infty}$

με N να δηλώνει τον αριθμό των σημείων ολοκλήρωσης και u_N είναι η αντίστοιχη αριθμητική λυση. Παρατηρήστε την ταχεία πτώση του σφάλματος καθώς αυξάνονται τα σημεία ολοκλήρωσης.



Σχήμα 8: Το σχετικό σφάλμα Ε_N

3.2 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε ομογενή παραβολικά μηγραμμικά προβλήματα στις 1 + 1 διαστάσεις διαστάσει

Πρόβλημα Ι

Το πρώτο πρόβλημα μοντέλο, που χρησιμοποιήθηκε για την μελέτη της συμπεριφοράς της μεθόδου HC-SSPRK, περιγράφεται από την γενικευμένη εξίσωση του Fisher ως ακολούθως:

$$u_t = [(1-u)u_x]_x + 2u - 2u^2 \quad , \qquad -5\pi/2 \le x \le 5\pi/2, \quad 0 \le t \le T$$
$$u_x(\frac{-5\pi}{2}, t) = 0, \quad u_x(\frac{5\pi}{2}, t) = 0 \quad , \qquad u(x, 0) = \frac{1}{3} \left[2 + \sin\left(-x\right)\right]$$
(12)

και επιδέχεται την αναλυτική λύση

$$u(x,t) = \frac{1}{3} \left[\frac{e^{-t} (3e^{2t} + 1 + 2\sin(-x))}{e^t + e^{-t}} \right].$$

Το χωρικό απόλυτο σφάλμα που χρησιμοποιήθηκε σε όλα τα πειράματα ορίζεται απο τη σχέση $\mathcal{E}^n := ||U(x,t^n) - u(x,t^n)||_2$ και οι απαραίτητοι περιορισμοί που τέθηκαν στην χρονική διαμέριση είναι $\Delta t \leq \frac{1}{5}h^2$ για την SSP(4,3), $\Delta t \leq \frac{1}{10}h^2$



για την SSP(3,3) και $\Delta t \leq \frac{1}{9}h^2$ για την RK4. Υπο αυτούς τους περιορισμούς όλα τα χρονικά σχήματα έχουν υψηλή ευστάθεια, όπως φαίνεται στην εικόνα b του σχήματος Σχ. 9 για την SSP(4,3) ενώ, την ίδια στιγμή, η $O(h^4)$ τάξη σύγκλισης της HC διατηρείται (βλέπε πίνακα Ι). Το μέγιστο σφάλμα $\mathcal{E}^1 = \max{\mathcal{E}^n}$ και ο υπολογιστικός χρόνος που χρειάζεται να φτάσει το πρόβλημα στοⁿ χρόνο t = 1 συμπεριλαμβάνονται επίσης στον πίνακα Ι ώστε να δειχθεί η αποτελεσματικότητα της μεθόδου. Για να είναι πιο κατανοητή η σύγκριση των σχημάτων υλοποιήσαμε επίσης και την απλή μέθοδο RK τέταρτης τάξης.



Σχήμα 9: a) Αναλυτική (συμπαγής) και HC-SSPRK(4,3) προσεγγιστική (σημεία) λύση για N = 64 b) Χωρικό απόλυτο σφάλμα σαν συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)

				<u> </u>					
	$\mid\mid$ Απόλυτο Χωρικό Σφάλμα στο $t=\Delta t$			Χωρική Τάξη Σύγκλισης			Χρόνος (sec)		
Ν	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4
32	1.53e-04	1.56e-04	1.54e-04	-	-	-	0.01	0.03	0.02
64	9.85e-06	9.89e-06	9.87e-06	3.95	3.98	3.97	0.05	0.05	0.06
128	6.20e-07	6.20e-07	6.20e-07	3.99	3.99	3.99	0.14	0.20	0.29
256	3.88e-08	3.89e-08	3.88e-08	4.00	4.00	3.99	0.72	1.07	1.42
512	2.56e-09	2.56e-09	2.55e-09	3.93	3.93	3.92	4.28	6.48	7.87

Πίνακας Ι Υπολογιστική Επίδοση των σχημάτων HC-RK

3.2.1 Πρόβλημα ΙΙ

Το δεύτερο πρόβλημα που χρησιμοποιήσαμε για να ερευνήσουμε την συμπεριφορά της HC-RK δίνεται απο:

$$u_t = [(1-2u)u_x]_x + \frac{1}{2}u - u^2 \quad , \qquad -\pi \le x \le \pi, \quad 0 \le t \le T$$
$$u_x(-\pi, t) = 0, \quad u_x(\pi, t) = 0 \quad , \qquad u(x, 0) = \frac{1}{2} - \frac{1}{6}\left(1 + \sin\frac{x}{2}\right)$$
(13)

και επαληθεύει την αναλυτική λύση $u(x,t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{3} \left(1 + \sin \frac{x}{2}\right) \left(1 + e^{\frac{t}{2}}\right)^{-1}$.





Σχήμα 10: (a) Χρονική σύγκριση σε δευτερόλεπτα μεταξύ των SSPRK(4,3)-(3,3) & RK4. (b) Το απόλυτο σχετικό σφάλμα της μεθόδου ως συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)



Σχήμα 11: (a) Αναλυτική λύση και (b) κάτοψη λύσης για την εξ. (13)

Οι απαραίτητοι χρονικοί περιορισμοί που πρέπει να θέσουμε είναι $\Delta t = \frac{1}{5}h^2$ για την SSPRK(4,3), $\Delta t = \frac{1}{10}h^2$ για την SSPRK(3,3) και $\Delta t = \frac{1}{9}h^2$ για την RK4. Κάτω απο αυτούς τους περιορισμούς, διατηρούνται οι συνθήκες ευστάθειας και η τάξη σύγκλισης της HC για κάθε σχήμα χρονικής διακριτοποίησης. Η εξάρτηση του χρονικού βήματος απο το h^2 συνεπάγει στο υψηλό υπολογιστικό κόστος του προβλήματος. (Σημειώνουμε ότι για το πρόβλημα II $h = 2\pi/N$, ενώ για το πρόβλημα I $h = 5\pi/N$).

Η συνάρτηση του απόλυτου χωρικού σφάλματος της εξίσωσης, όπως φαίνεται στο Σχ. 12, επιβεβαιώνει την παρατήρηση μας στο Πρόβλημα Ι, ότι ο συνδυασμός της HC με ένα σχήμα χρονικής διακριτοποίησης Strong Stability παράγει μια ευσταθή μέθοδο υψηλής τάξης για μη γραμμικά παραβολικά προβλήματα



_	,			A []					
	Απόλυτο Χ	ωρικό Σφάλμ	а ото $t = \Delta t$	Χωρική Τάξη Σύγκλισης			Χρόνος (sec)		
Ν	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4
32	1.27e-07	1.27e-07	1.27e-07	-	-	-	0.18	0.27	0.31
64	7.94e-09	7.94e-09	7.94e-09	3.99	3.99	3.99	0.72	1.10	1.31
128	4.96e-10	4.96e-10	4.96e-10	3.99	3.99	3.99	3.33	5.06	5.95
256	3.10e-11	3.10e-11	3.10e-11	3.99	3.99	3.99	26.23	19.52	30.81
512	1.94e-12	1.94e-12	1.94e-12	3.99	4.00	4.00	99.69	151.78	175.80

Πίνακας ΙΙ Υπολογιστική Επίδοση των σχημάτων HC-RK

παραβολικής φύσης (αυτή η παρατήρηση φυσικά ισχύει με την υπόθεση ότι η λύση είναι επαρκώς ομαλή).



Σχήμα 12: (a) Χρονική σύγκριση σε δευτερόλεπτα μεταξύ των SSPRK(4,3)-(3,3) & RK4. (b) Το απόλυτο σχετικό σφάλμα της μεθόδου ως συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)

3.2.2 Πρόβλημα ΙΙΙ

Το τρίτο πρόβλημα που επιλέξαμε για την μελέτη της συμπεριφοράς της μεθόδου HC-RK δίνεται απο:

$$u_t = u - 2u^2 + u_{xx} \quad , \qquad -10 \le x \le 10, \quad 0 \le t \le T$$

$$u_x(-10,t) = f(-10) \quad , \qquad u_x(10,t) = f(10) \tag{14}$$

$$f(x) = \frac{e^{\frac{5}{3}t + \sqrt{\frac{2}{3}x}}}{\sqrt{6}(e^{\frac{5}{6}t + \frac{1}{\sqrt{6}}x} + 1)^3} \quad , \quad u(x,0) = -\frac{1}{8} \left[sech^2 \frac{\sqrt{6}}{12} x - 2tanh \frac{\sqrt{6}}{12} x - 2 \right]$$

Η Εξ. (14) ανήκει στην οικογένεια των Κλασσικών εξισώσεων Fisher, όπου ο συντελεστής διάχυσης είναι σταθερός. Αναλυτικές λύσεις για τέτοιου τύπου εξισώσεις δίνεται στο [11].





Σχήμα 13: (a) Αναλυτική Λύση και (b) κάτοψη της λύσης για την εξ. (14)

Ο απαραίτητος περιορισμός για το χρονικό βήμα είναι $\Delta t \leq \frac{1}{10}h^2$ για την SSPRK(4,3), $\Delta t \leq \frac{1}{15}h^2$ για την SSPRK(3,3) και $\Delta t \leq \frac{1}{13}h^2$ για την RK4. Με αυτούς τους περιορισμούς πετυχαίνουμε την τάξη σύγκλισης της HC (Πίνακας II) ενώ, οι ιδιότητες ευστάθειας για όλα τα χρονικά σχήματα είναι χαλαρωμένες (Σχ. 14b).



Σχήμα 14: (a) Χρονική σύγκριση σε δευτερόλεπτα μεταξύ των SSPRK(4,3)-(3,3) & RK4. (b) Το απόλυτο σχετικό σφάλμα της μεθόδου ως συνάρτηση του χρόνου για την HC-SSPRK(4,3)

Αυτή η εξίσωση χρειάζεται πυκνότερη χρονική διαμέριση από τα προηγούμενα προβλήματα, λόγω της κινούμενης άκαμπτης λύσης που παρουσιάζει. Αυτή η ιδιαιτερότητα της λύσης επηρεάζει την ευστάθεια και τον υπολογιστικό χρόνο των σχημάτων Runge-Kutta (Πίνακας III & Σχ. 14a).



Απόλυτο Χωρικό Σφάλμα στο $t=\Delta t$				Χωρική Τάξη Σύγκλισης			Χρόνος (sec)		
Ν	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4	SSP(4,3)	SSP(3,3)	RK4
32	2.85e-06	2.86e-06	2.84e-06	-	-	-	0.10	0.13	0.15
64	1.78e-07	1.78e-07	1.77e-07	4.00	4.00	3.99	0.45	0.56	0.61
128	1.11e-08	1.11e-08	1.11e-08	4.00	4.00	4.00	1.85	2.09	2.42
256	6.94e-10	6.94e-10	6.93e-10	4.00	4.00	3.99	8.30	9.67	10.14
512	4.22e-11	4.22e-11	4.22e-11	4.03	4.03	4.03	35.66	45.01	44.74

Πίνακας ΙΙΙ Υπολογιστική Επίδοση των σχημάτων HC-RK

3.3 Επικύρωση αποτελεσμάτων σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1 + 2 διαστάσεις

Θεωρούμε την εξίσωση

$$\begin{split} \frac{\partial c}{\partial t} &= \nabla \cdot \left[D \nabla (c) \right] \quad , \quad c := c(x,y,t) \\ & (x,y) \in [a,b]^2 \quad , \quad 0 \leq t \leq T \\ c(x,y,0) &= f(x,y) \quad , \quad \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \end{split}$$

όπου

$$D = \left\{ \begin{array}{ll} \gamma & , & (x,y) \in [-4,-2] \times [-4,4] \\ 1 & , & (x,y) \in (-2,2) \times (-2,2) \\ \gamma & , & (x,y) \in [2,4] \times [-4,4] \end{array} \right.$$



Σχήμα 15: Αριθμητική Λύση του προβλήματος τύπου Stripes σε 2+1 διαστάσεις

Όπως μπορεί κανείς εύκολα να παρατηρήσει στο Σχ. (15), διακρίνονται οι διαφορετικές περιοχές στο χωρίο όπου στις γραμμές διεπαφής σχηματίζεται η ασυνεχής πρώτη παράγωγος της λύσης. Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει στο τέσσερα (Σχ. (16)) ενώ ο υπολογιστικός χρόνος επίλυσης της εξίσωσης αυξάνει πολυωνυμικά.





Σχήμα 16: Τάξη σύγκλισης της Μεθόδου DHC-DIRK και χρόνος υπολογισμού.

4 Παραδοτέα

- Ι. Αθανασάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, Runge-Kutta and Hermite Collocation for a biological invasion problem modeled by a generalized Fisher equation, 2nd International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences 2013 (Παρουσίαση)
- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.
- Η παρούσα τεχνική έκθεση.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε. Παπαδοπούλου, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη, Δρ. Α. Σηφαλάκη και τον υποψήφιο διδάκτορα Ι. Αθανασάκη.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ως σκοπό την ολοκλήρωση του συνολικού στόχου του προγράμματος, προγραμματίζουμε ως μελλοντικές δράσεις της ομάδας μας

- Διερεύνηση νέων αριθμητικών σχημάτων για την χρονική διακριτοποίηση μη γραμμικών ΜΔΕ πολλαπλών πεδίων
- Μελέτη συμπεριφοράς της μεθόδου dDHC σε μη-γραμμικά προβλήματα στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις.



- Μελέτη συμπεριφοράς της μεθόδου dDHC σε προβλήματα με ορθογώνια γεωμετρία αλλά με ασυνέχεια του συντελεστή διάχυσης ταυτόχρονα και στις δύο διαστάσεις.
- Ψηφιοποίηση ιατρικών απεικονίσεων MRI (Magnetic Resonance Imaging) και διακριτοποίηση μέσω εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού και του FEniCS.

Αναφορές

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



- [11] Duan WS, Yang HJ and Shi YR *An exact solution of Fisher equation and its stability*, Chinese Physics, **15**, 1414-17, 2006
- [12] Fisher RA The wave of advance of advantageous genes, Ann. Eugen., 7, 255-369, 1937
- [13] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001
- [14] Gottlieb S and Shu CW Total variation diminishing Runge-Kutta schemes, Mat. Comp., 67, 73-85, 1998
- [15] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., **1(6)**, 1-25, 1937
- [16] Hairer E *Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations*, Numer. Math., **35**, 57-68, 1980
- [17] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989
- [18] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths "The Finite Difference Method in Partial Differential Equations," *John Willey & Sons*, 1980.
- [19] Murray JD Mathematical Biology, Springer, Berlin, 1989
- [20] M.G. Papadomanolaki "The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations", *PhD Thesis*, Technical University of Crete, 2012 (in Greek)
- [21] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010
- [22] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002
- [23] Schmitt B Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations, BIT, 28, 884-897, 1988
- [24] Shu CW Total-variation-diminishing time discretizations, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 9, 1073-1084, 1988



 $\Delta 4.2/21$

- [25] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988
- [26] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.
- [27] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.
- [28] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.
- [29] K.R.Swanson, C.Bridge, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr "Virtual and real brain tumours: using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.
- [30] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.
- [31] D.E.Woodward, J.Cook, P.Tracqui, G.C.Cruywagen, J.D.Murray, and E.C.Alvord Jr."A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection," *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.



Παράρτημα Θ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3



Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2013



ΘΑΛΗΣ – Πολυτεχνείο Κρήτης

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

Δράση 4.3

Επικύρωση Αποτελεσμάτων σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής



Περιεχόμενα

1	Σκο 1.1	πός Μελέτη στρατηγικών άντλησης σε υπόγειους υδροφορείς	3 3				
2	Μεθ	οδολογία	3				
	2.1	Στοχαστικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης ALOPEX ΙΙ	3				
	2.2	Διαδικασία κυρώσεων ελέγχου	5				
	2.3	Αποτελέσματα αριθμητικής προσομοίωσης παράκτιου υδροφο-					
		ρέα περιοχής Βαθέως Καλύμνου	5				
3	Μελλοντικές Δράσεις						
4	Παραδοτέα						
5	δ Συνεργασίες						



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 μελετάται μία διαδικασία κυρώσεων ελέγχου η οποία πλαισιώνει τον στοχαστικό αλγόριθμο βελτιστοποίησης ALOPEX II. Η μελέτη της συμπεριφοράς της διεξάγεται μέσω του αναλυτικού μοντέλου περιγραφής ορθογώνιων υδροφορέων, που έχουμε περιγράψει στην Τεχνική Έκθεση 2012 της αντίστοιχης δράσης, το οποίο προσομοιώνει τον υπόγειο υδροφορέα στο Βαθύ Καλύμνου.

1.1 Μελέτη στρατηγικών άντλησης σε υπόγειους υδροφορείς

Την τρέχουσα περίοδο χρησιμοποιούμε την αναλυτική λύση ενός κλασικού μοντέλου προσομοίωσης υπόγειας ροής νερού καθώς και τον αλγόριθμο στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX ΙΙ, με σκοπό να δημιουργήσουμε ένα μοντέλο ελέγχου αντλήσεων γλυκού νερού σε παράκτιους υδροφορείς. Επιδίωξή μας είναι η μεγιστοποίηση της άντλησης πόσιμου ύδατος από τον υδροφορέα υπό μελέτη, εξασφαλίζοντας ταυτόχρονα την προστασία του από το φαινόμενο της υφαλμύρισης.

Προς τούτο, μελετάται η αποτελεσματικότητα ενός συστήματος ελέγχου, που συνδυάζεται με τον αλγόριθμο στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX II, και περιλαμβάνει την διαβαθμισμένη επίδραση των ενεργών πηγών άντλησης στην μετακίνηση του μετώπου διεπαφής μεταξύ του αλμυρού και γλυκού νερού.

Η συμπεριφορά της νέας αυτής διαδικασίας διαχείρισης των αντλήσεων αποτιμάται με την διενέργεια προσομοιώσεων που αφορούν ένα πλήθος σεναρίων άντλησης και καιρικών συνθηκών, σε έναν υδροφορέα ορθογώνιας γεωμετρίας που προσομοιώνει τον υπόγειο υδροφορέα στην περιοχή Βαθύ Καλύμνου.

2 Μεθοδολογία

2.1 Στοχαστικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης ALOPEX ΙΙ

Την τρέχουσα περίοδο χρησιμοποιούμε ένα γνωστό από τη βιβλιογραφία μαθηματικό μοντέλο, όπως αυτό παρουσιάζεται στα [2] και [3] και έχουμε περιγράψει αναλυτικά στην ΤΕ της παρούσας δράσης έτους 2012, μέσω του οποίου μο-



ντελοποιείται αριθμητικά και μελετάται η διαχείριση της άντλησης γλυκού νερού με μια διαδικασία στοχαστικής βελτιστοποίησης.

Το υπό μελέτη πρόβλημα έγκειται στον καθορισμό των μέγιστων τιμών αντλήσεων Q(i), i = 1, .., n, όπου n το πλήθος των πηγαδιών στο εσωτερικό του υδροφορέα, χωρίς όμως να διακινδυνεύσει καμία εκ των ενεργών πηγών άντλησης (πηγάδια/γεωτρήσεις) από εισβολή αλμυρού νερού και μόλυνσή της. Το αντίστοιχο πρόβλημα βελτιστοποίησης διατυπώνεται ως εξής:

Maximize:

$$P(Q_1, ..., Q_n) = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q(i)}{\sum_{i=1}^{n} Q_{local}^{max}(i)}$$

under the constraints:
$$x_{well}(i) - x_{toe}(i) \ge D,$$

$$0 \le Q_{local}^{min}(i) \le Q(i) \le Q_{local}^{max}(i) \le Q_{aquifer}^{total},$$
(1)

όπου $x_{toe}(i)$ δηλώνει την x-συντεταγμένη της υφάλμυρης διεπιφάνειας απέναντι από το i-πηγάδι του υδροφορέα και $D = x_{well}(i) - safety_point(i) \ge 0$ είναι μια απόσταση ασφαλείας (βλέπε σχήμα 1), ενώ $Q_{local}^{min}(i)$ και $Q_{local}^{max}(i)$ είναι αντίστοιχα η ελάχιστη και η μέγιστη δυνατή ποσότητα γλυκού νερού που μπορεί να αντληθεί από κάθε πηγάδι.



Σχήμα 1: Σημεία ασφαλείας μπροστά από κάθε πηγάδι στο εσωτερικό του υδροφορέα.

Οι νέες τιμές των ρυθμών άντλησης υπολογίζονται σε κάθε επαναληπτικό βήμα του αλγορίθμου ALOPEX ΙΙ, χρησιμοποιώντας το παρακάτω σχήμα:

$$Q^{(k)}(i) = Q^{(k-1)}(i) + c[Q^{(k-1)}(i) - Q^{(k-2)}(i)][P^{(k-1)} - P^{(k-2)}] + g^{(k)}(i), \quad (2)$$



με c να συμβολίζει την ελεύθερη παράμετρο του όρου ανατροφοδότησης (feedback) και $q^{(k)}(i)$ τον θόρυβο.

2.2 Διαδικασία κυρώσεων ελέγχου

Με στόχο την προστασία των πηγαδιών του υδροφορέα από το φαινόμενο της υφαλμύρισης, κατάλληλα επιλεγμένες διαδικασίες κυρώσεων ελέγχου χρησιμοποιούνται σε κάθε επαναληπτικό βήμα του αλγορίθμου βελτιστοποίησης (βλέπε την Τεχνική Έκθεση έτους 2014 για μία αναλυτική περιγραφή ενός συστήματος κυρώσεων). Εμείς εδώ περιγράφουμε μία επιπλέον διαδικασία προστασίας των πηγαδιών, πέραν της βασικής η οποία μειώνει τις τιμές των αντλήσεων σε εκείνα τα πηγάδια όπου η υφάλμυρη σφήνα πλησιάζει τα σημεία ασφαλείας απέναντί τους.

Πιο συγκεκριμένα θεωρούμε ότι η βασική διαδικασία συνοδεύεται από μία επιπλέον διαδικασία κυρώσεων ελέγχου σχετική με την επίδραση του i-πηγαδιού στο *j*-πηγάδι στο εσωτερικό του υδροφορέα, σε κάθε επανάληψη. Για τον λόγο αυτό εισάγουμε την έννοια του $n \times n$ τετραγωνικού πίνακα risk to each other, όπου κάθε στοιχείο του υπολογίζεται σύμφωνα με το ακόλουθο σχήμα:

$$if \ i \neq j \ and \ x_{well}(i) \ge x_{well}(j) \\ risk_to_each_other^{(k)}(i,j) = \frac{\sum_{i=1}^{n} Q_{local}^{max}(i) - Q^{(k)}(i)}{\sum_{i=1}^{n} Q_{local}^{max}(i)} * \frac{safety_point(i) - x_{toe}^{(k)}(i)}{L} * \\ * \frac{\sqrt{[x_{well}(i) - x_{well}(j)]^2 - [y_{well}(i) - y_{well}(j)]^2}}{\sqrt{L^2 + W^2}} else$$

risk to each other^(k)(i, j) = 0, for $i, j \in \{1, 2, ..., n\}$, at k iteration. (3)

Τότε, οι διαδικασίες κυρώσεων ελέγχου risk penalties ενεργοποιούνται για κάθε πηγάδι του υδροφορέα, σύμφωνα με το παρακάτω σχήμα:

 $if risk_to_each_other^{(k)}(i, j) = 0 : risk_penalty = 1,$ $if risk_to_each_other^{(k)}(i, j) \in (0, 0.020): risk_enalty = 0.98,$ if risk to each other^(k) $(i, j) \in [0.020, 0, 045)$: risk penalty = 0.96, (4) if risk to each other^(k) $(i, j) \in [0.45, 0.070)$: risk penalty = 0.92, if risk to each other^(k) $(i, j) \in [0.070, 1]$: risk penalty = 0.88.

2.3 Αποτελέσματα αριθμητικής προσομοίωσης παράκτιου υδροφορέα περιοχής Βαθέως Καλύμνου

Ο αλγόριθμος ALOPEX ΙΙ, σε έναν τυπικό έλεγχο 300 επαναλήψεων, καλείται να υπολογίσει τις βέλτιστες αντλήσεις για όλα τα πηγάδια του υδροφορέα, χρησιμοποιώντας το σχήμα διαχείρισης των αντλήσεων που περιγράψαμε ανωτέρω.



Αν και οι αρχικές τιμές εκκίνησης των αντλήσεων αντιστοιχούν σε μια χαμηλή τιμή της συνάρτησης κόστους, η συγκεκριμένη μέθοδος βελτιστοποίησης κατάφερε να συγκλίνει σε μια βέλτιστη λύση εντός ολίγων επαναλήψεων. Οι βέλτιστοι ρυθμοί άντλησης που επετεύχθησαν μέσω της διαδικασίας αυτής είναι οι ακόλουθοι:

$$Q^{opt} = (762.90, 346.21, 1240.82, 1378.89, 206.12)m^3/day,$$

$$\sum_{i=1}^5 Q^{opt}(i) = 3934.95m^3/day.$$
(5)

Όλα τα πηγάδια παρέμειναν ασφαλή από το φαινόμενο της υφαλμύρισης (βλέπε σχήμα 2α΄).



(α΄) Βασική περίπτωση: Όλα τα πηγάδια του υδροφορέα παραμένουν ασφαλή εξαιτίας της επιτυχούς εφαρμογής των κυρώσεων ελέγχου.



(γ΄) Περίπτωση 3: Με την απενεργοποίηση της διαδικασίας x_movement κυρώσεων ελέγχου ο συνολικός όγκος αντλούμενου νερού παραμένει μικρότερος από αυτόν της βασικής περίπτωσης.



(β΄) Περίπτωση 1: Οι βέλτιστες αντλήσεις της βασικής περίπτωσης προσαυξημένες κατά 2% οδηγούν στην υφαλμύριση του πηγαδιού No2.



(δ΄) Περίπτωση 4: Η απενεργοποίηση της διαδικασίας risk_to_each_other κυρώσεων ελέγχου οδηγεί πολύ σύντομα στην υφαλμύριση ενός ή και περισσότερων πηγαδιών του υδροφορέα.

Σχήμα 2: Εφαρμογή του αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX ΙΙ στην περίπτωση του υδροφορέα της περιοχής Βαθύ Καλύμνου.

Περίπτωση 1: Τεχνητή αύξηση των βέλτιστων ποσοτήτων άντλησης Προκειμένου να εξεταστεί η ευαισθησία της λύσης που παρουσιάζεται στην ανωτέρω προτεινόμενη βέλτιστη λύση (5), μελετήσαμε την επίδραση της αύξησης κατά 2% του βέλτιστου ρυθμού άντλησης σε όλα τα πηγάδια του συγκεκριμένου υδάτινου



υδροφορέα.

Το τροποποιημένο νέο σύστημα άντλησης έχει ως εξής:

$$Q^{opt} = (778.16, 353.13, 1265.64, 1406.48, 210.24)m^3/day,$$

$$\sum_{i=1}^5 Q^{opt}(i) = 4013.65m^3/day.$$
(6)

Μελετώντας το σχήμα 2β΄, γίνεται φανερό ότι μια τέτοια αύξηση αντλήσεων έχει ως συνέπεια τη μόλυνση με αλμυρό νερό του πηγαδιού No2. Αυτό οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η διαδικασία βελτιστοποίησης ALOPEX και το σύστημα ελέγχου κυρώσεων παρήγαγαν ικανοποιητικά αποτελέσματα αλλά ευαίσθητα σε μικρές διαταραχές. Συνεπώς μία μελέτη ευστάθειας των υπολογισμών είναι απολύτως απαραίτητη.

Περίπτωση 2: Τεχνητή αύξηση του συντελεστού βροχόπτωσης Ν Θεωρούμε σαν υπόθεση εργασίας την περίπτωση μιας 20% αύξηση της τιμής του συντελεστού βροχόπτωσης Ν σε ολόκληρη την επιφάνεια του υδροφορέα. Η νέα συνθήκη είναι N = 1.20 * 30 = 33mm/year και ο αλγόριθμος ALOPEX ΙΙ καλείται να υπολογίσει τις νέες βέλτιστες τιμές αντλήσεων. Διαπιστώνουμε λοιπόν μια αύξηση 7.72% στο συνολικό όγκο του αντλούμενου γλυκού νερού, ενώ όλα τα πηγάδια διατηρούνται ασφαλή από το φαινόμενο της υφαλμύρισης. Το σύστημα ελέγχου κυρώσεων παρέμεινε το ίδιο με αυτό που εφαρμόσαμε στον αρχικό έλεγχο του υδροφορέα και οι νέες αντλήσεις είναι οι ακόλουθες:

$$Q^{opt} = (1449.21, 240.14, 946.72, 1380.36, 222.27)m^3/day,$$

$$\sum_{i=1}^5 Q^{opt}(i) = 4238.69m^3/day.$$
(7)

Περίπτωση 3: Απενεργοποίηση των x_movement κυρώσεων ελέγχου Oι x_movement κυρώσεις ελέγχου ενεργοποιούνται όταν το μέτωπο του υφάλμυρου νερού φτάνει τα σημεία ασφαλείας μπροστά από κάθε πηγάδι (βλέπε σχήμα 1). Πρόκειται για την πρώτη γραμμή άμυνας απέναντι στην προέλαση του υφάλμυρου νερού στο εσωτερικό του υδροφορέα. Με αυτόν τον τρόπο όταν ένα πηγάδι βρίσκεται σε κίνδυνο, το πρώτο μέτρο αντίδρασης είναι η μείωση του όγκου νερού που αντλείται από το συγκεκριμένο πηγάδι. Αυτό όμως σημαίνει ότι οι x_movement κυρώσεις ελέγχου έχουν μόνο τοπικές επιδράσεις στο συνολικό πλάνο αντλήσεων του υδροφορέα, με συνέπεια οι κυρώσεις αυτές να είναι ιδιαίτερα αποδοτικές στις μικροδιορθώσεις του συνολικού πλάνου αντλήσεων. Είναι επαναληπτική μέθοδο με έντονες διαφορές στις αντλήσεις από βήμα σε βήμα, δηλαδή δεν καθίσταται δυνατή η σύγκλιση της όλης διαδικασίας (βλέπε σχήμα 2γ΄). Για την παρούσα μοντελοποίηση χρησιμοποιούμε το παρακάτω σχήμα διαχείρισης των αντλήσεων:



$$x_movement_penalty = 1.00, risk_penalties = (1.00, 0.98, 0.96, 0.92, 0.88).$$
(8)

Οι νέες βέλτιστες τιμές των αντλήσεων είναι οι ακόλουθες:

$$Q^{opt} = (830.22, 843.38, 732.72, 713.35, 736.74)m^3/day,$$

$$\sum_{i=1}^{5} Q^{opt}(i) = 3856.41m^3/day.$$
(9)

Περίπτωση 4: Απενεργοποίηση των risk_to_each_other κυρώσεων ελέγχου Με στόχο να αποδείξουμε την αναγκαιότητα ύπαρξης των risk_to_each_other κυρώσεων μέσα στη διαδικασία βελτιστοποίησης που περιγράφουμε, μελετάμε την περίπτωση απενεργοποίησης των κυρώσεων αυτών. Πιο συγκεκριμένα έχουμε ότι:

$$x_movement_penalty = 0.95, risk_penalties = (1.00, 1.00, 1.00, 1.00, 1.00).$$
(10)

Οι τιμές των βέλτιστων αντλήσεων έπειτα από λίγες μόλις επαναλήψεις είναι οι ακόλουθες:

$$Q^{opt} = (724.34, 279.59, 1495.30, 292.26, 1449.60)m^3/day,$$

$$\sum_{i=1}^5 Q^{opt}(i) = 4241.09m^3/day.$$
(11)

Τα αποτελέσματα είναι καταστροφικά για τα πηγάδια No2 και No3 του υδροφορέα (βλέπε σχήμα 2δ΄). Μέσα σε λίγες επαναλήψεις το υφάλμυρο νερό διεισδύει και στα δύο αυτά πηγάδια, παρά το γεγονός ότι οι αντλήσεις σε αυτά έπεσαν στις χαμηλότερες επιτρεπόμενες τιμές, εξαιτίας των διαρκών ενεργοποιήσεων των x_movement κυρώσεων ελέγχου. Ωστόσο, τα πηγάδια No3 και No5 παρέμειναν ασφαλή, έχοντας φτάσει τις μέγιστες επιτρεπόμενες τιμές τους, προστατεύοντας έτσι το πηγάδι No1. Η ανάγκη για μια έντονη επέμβαση από εμάς είναι πιο επιτακτική από κάθε άλλη φορά.

Συμπερασματικά, η εφαρμογή του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX II, σε συνδυασμό με το προτεινόμενο σύστημα ελέγχου κυρώσεων στην περίπτωση του υδροφορέα της Καλύμνου, έχει ως συνέπεια την κατασκευή ενός αποτελεσματικού αλλά ευαίσθητου πλάνου διαχείρισης των αντλήσεων του υδροφορέα. Οι τιμές των αντλήσεων τις οποίες προτείνει ως βέλτιστες ο παραπάνω αλγόριθμος, προσφέρουν ικανοποιητική ποσότητα πόσιμου νερού ισοδύναμο με αυτό που προτείνεται σε προηγούμενες έρευνες της βιβλιογραφίας, ενώ ταυτόχρονα διατηρούνται ασφαλείς οι τοπικές γεωτρήσεις από το φαινόμενο της υφαλμύρισης.



3 Μελλοντικές Δράσεις

Οι μελλοντικοί ερευνητικοί στόχοι εξειδικεύονται ως εξής:

- Εισαγωγή μίας νέας αντικειμενικής συνάρτησης κόστους, ικανής να συνδυάζεται με διαδικασίες feedback, όπως αυτή του αλγορίθμου ALOPEX.
- Ανάπτυξη μίας νέας μορφής του αλγορίθμου ALOPEX με μεταβλητές παραμέτρους.
- Βελτιστοποίηση των παραμέτρων του αλγορίθμου ALOPEX ώστε να επιταχυνθεί η σύγκλισή του.
- Κατασκευή ενός αποτελεσματικού συστήματος penalty για τον έλεγχο εξέλιξης της διαδικασίας βελτιστοποίησης ALOPEX.
- Κατασκευή κριτηρίων τερματισμού της διαδικασίας βελτιστοποίησης.
- Μελέτη ευαισθησίας και ευστάθειας των υπολογισμών.

Επίσης, η επίλυση του συγκεκριμένου προβλήματος δοκιμής στο λογισμικό FEniCS θα βοηθήσει στην επικύρωση των αποτελεσμάτων επίλυσης των προβλημάτων πολλαπλών πεδίων.

4 Παραδοτέα

- Τα αποτελέσματα της παρούσας έρευνας παρουσιάστηκαν στο συνέδριο 5th International Conference on Mathematical Modeling in Physical Sciences, Prague, Czech Republic, September, 1-5, 2013. Στη συνέχεια δημοσιεύθηκαν στο Journal of Physics: Conference Series υπό τον τίτλο:
 P. Stratis, Y. Saridakis, E. Papadopoulou and M. Zakynthinaki, *ALOPEX* stochastic optimization for pumping management in freshwater coastal aquifers, Journal of Physics: Conference Series, 490, 012112, 2014.
- Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση του Προγράμματος, που αφορά τη Δράση 4.3 για το έτος 2013.

5 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. Μαθιουδάκης, Επίκουρος Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Μ. Ζακυνθινάκη, Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, 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.

