Ετήσια Έκθεση Προόδου

Έτος 2014

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)

ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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.

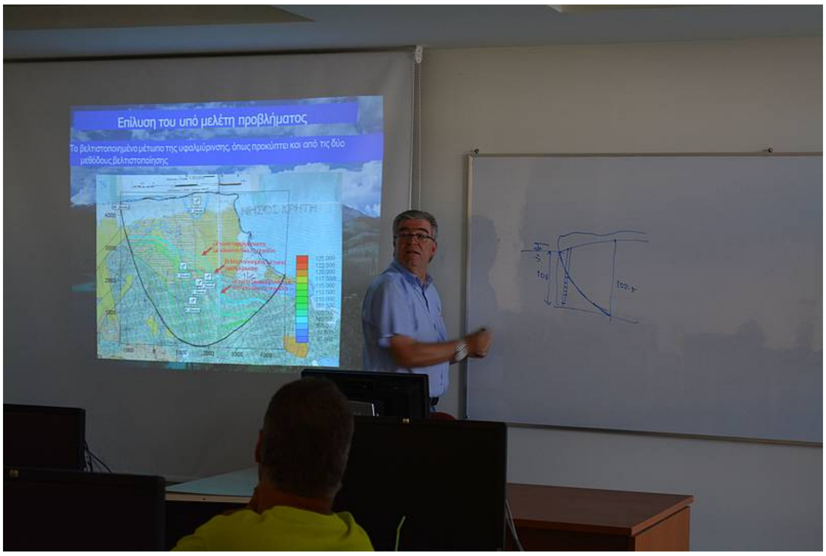
1.2 Δραστηριότητες Έτους 2014

Κατά τη διάρκεια του έτους 2014, σύμφωνα με το προγραμματισμό του ΤΔΥ, διοργανώθηκαν δύο (2) συναντήσεις των συντονιστών των ΚΕΟ με διοικητικά-οικονομικά θέματα καθώς και με θέματα σχετικά με την παρακολούθηση της πορείας εξέλιξης του φυσικού και οικονομικού αντικειμένου, αλλά και τον συντονισμό διμερών ερευνητικών συνεργασιών. Τον Ιούλιο διοργανώθηκε με επιτυχία στο Πολυτεχνείο Κρήτης 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 Μάιο και τον Δεκέμβριο του 2014, παράλληλα με τις συναντήσεις συντονιστών. Οι πίνακες που ακολουθούν συνοψίζουν τις βασικές δραστηριότητες της δράσης.

ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΣΥΝΤΟΝΙΣΤΩΝ		
Α/Α	ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ
1η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Μάιος 2014
2η	Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας	Δεκέμβριος 2014

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

ΣΥΝΑΝΤΗΣΕΙΣ ΕΡΕΥΝΗΤΙΚΩΝ ΟΜΑΔΩΝ			
Α/Α	ΤΟΠΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΧΡΟΝΟΣ ΔΙΕΞΑΓΩΓΗΣ	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ
3η	Πολυτεχνείο Κρήτης	Ιούλιος 2014	9



Από τη διοργάνωση της $3^{ης}$ Ερευνητικής Συνάντησης στο Πολυτεχνείο Κρήτης, Χανιά

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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:

- Ανάπτυξη των μη γραμμικών Collocation εξισώσεων με ασυνεχή Hermite δι-κυβικά πολυώνυμα για προβλήματα στις 1+2 διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται μόνο στην μία από τις δύο διαστάσεις (τύπου stripes).
- Ανάπτυξη και μελέτη της τάξης σύγκλισης της dDHC μεθόδου για γενικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+2 διαστάσεις που επιτρέπουν οι ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης να παρουσιάζονται και στις δύο χωρικές διαστάσεις ταυτόχρονα. Με τον τρόπο αυτό παρουσιάζονται *γωνιακές* ασυνέχειες, δηλαδή εσωτερικές γωνίες όπου και οι μερικές παράγωγοι ως προς x και ως προς y είναι ταυτόχρονα ασυνεχείς.
- Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με *γενικευμένα δι-κυβικά* συνεχή πολυώνυμα για γενικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

διαστάσεις με γωνιακές ασυνέχειες. Ανάπτυξη της Hermite Collocation μεθόδου με χρήση τανυστικών γινομένων και τετάρτη τάξη σύγκλισης.

- Ανάπτυξη φορμαλισμού για προβλήματα πολλαπλών πεδίων όπου ο συντελεστής διάχυσης ορίζεται μέσω γενικευμένων συνεχών συναρτήσεων με ασυνεχή παράγωγο σε ένα πεπερασμένο αριθμό σημείων του πεδίου ορισμού.
- Ανάπτυξη υβριδικής μεθόδου collocation (HC-IR) μέσω του συνδυασμού της με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ). Αρχική μελέτη εφαρμογής σε γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 διαστάσεις.

Παράλληλα παρουσιάζονται σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια οι εργασίες:

- Ι. Αθανασάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, *Discontinuous Hermite Collocation and Runge-Kutta schemes for multi-domain linear and non-linear brain tumor invasion models* , NUMAN 2014, CMA 2014
- Ι. Αθανασάκης, Ν. Βιλανάκης, Ε. Μαθιουδάκης, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, *Solving discontinuous collocation equations for a class of brain tumor models on GPUs*, NUMAN 2014, CMA 2014

αναπτύσσεται λογισμικό σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB και συντάσσονται οι προβλεπόμενες από το τεχνικό δελτίο 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:

- Μελέτη των ΜΧΔ GEO και ROB σε περιβάλλον FEniCS.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Ανάπτυξη, μελέτη και υλοποίηση της μεθόδου ROB σε κατανεμημένο περιβάλλον με στόχο να καταστεί δυνατή η επίλυση προβλημάτων μεγάλου μεγέθους με μικρές απαιτήσεις υπολογιστικού χρόνου.
- Παραλληλοποίηση των ΜΧΔ σε cloud περιβάλλοντα μέσω της μεθόδου GEO.

Στα πλαίσια της εν λόγω Δράσης παρήχθησαν οι εξής δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια:

- Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, P. Tsompanopoulou, 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece. pp 260-265.
- Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method, A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, 6^{th} International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp 167-173.

Παράλληλα αναπτύσσεται πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων και ενσωματώνεται στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.

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 ΜΔΕ 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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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

Τη τρέχουσα ερευνητική περίοδο, τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα συνοψίζονται ως εξής:

- Ανάπτυξη του βασικού (generic) αλγορίθμου για το συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo και μίας ντετερμινιστικής μεθόδου επίλυσης των υπο-προβλημάτων.
- Υλοποίηση του βασικού αλγορίθμου, με χρήση τυχαίων περιπάτων σε σφαίρες και πεπερασμένων στοιχείων, για ελλειπτικά προβλήματα πολλαπλής φυσικής και πολλαπλών πεδίων στις 2 και 3 διαστάσεις.

Παράλληλα παρουσιάζεται σε διεθνές επιστημονικό συνέδριο η εργασία:

- Ε. Βάβαλης, Γ. Σαρηλίδης, *Implementing Hybrid PDE Solvers*, 11th Inter. Conference on Monte Carlo & Quasi-Monte Carlo methods in Scientific Computing, Leuven, Belgium, 2014

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 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 καθώς και με χρονικά εξαρτώμενους συντελεστές διάχυσης και ανάδρασης, στις $1+1$ διαστάσεις. Παράλληλα, ολοκληρώθηκε από

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

την ερευνητική ομάδα του καθ. Α. Φωκά η ανάπτυξη φορμαλισμού για την αντιμετώπιση της εξίσωσης θερμότητας στις δύο διαστάσεις (βλ. [?]) και επομένως ξεκίνησε η προσπάθεια επέκτασης της μεθόδου σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης.

Παράλληλα παρουσιάζεται σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια η εργασία:

- Α. Σηφαλάκης, Μ. Παπαδομανωλάκη, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, ”Fokas transform method for classes of advection-diffusion IBVPs”, NUMAN 2014, CMA 2014

και συντάσσονται οι προβλεπόμενες από το τεχνικό δελτίο εκθέσεις.

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.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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.

Η βασική ερευνητική δραστηριότητα την τρέχουσα περίοδο περιλαμβάνει:

- Υλοποίηση μεθόδων τόσο σε επίπεδο συστοιχιών (clusters) όσο και σε περιβάλλον Cloud μέσω υπηρεσιών διαδικτύου (web services). Ανάπτυξη και υλοποίηση ενός μοντέλου Λογισμικού σαν Υπηρεσία (SaaS – Software as a Service), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδικτυακού γραφικού περιβάλλοντος και μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές.
- Παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου χαλάρωσης στις διεπαφές GEO στη FEniCS με τη βοήθεια του RabbiMQ (προσανατολισμένο σε μηνύματα middleware).
- Προσομοιώσεις αξιολόγησης αλγορίθμων και λογισμικού.

Παράλληλα παρουσιάζονται και δημοσιεύονται σε πρακτικά διεθνούς επιστημονικού συνεδρίου οι εργασίες:

i. A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothnassis, “Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO”, Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ii. P. Alefragis, A. Spyrou, S. Likothanassis, “Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multi-domains” Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014

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).

Τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα της τρέχουσας περιόδου συνοψίζονται ως εξής:

- Χρησιμοποιήθηκε το εργαλείο SOpenCL για την υλοποίηση επιταχυντών υλικού επαναδιατασσόμενης λογικής για εφαρμογές που ανήκουν στα Dwarfs (σύνολα εφαρμογών που κάθε ένα από αυτά τα σύνολα μπορούν να χαρακτηρισθούν από ένα κοινό πρότυπο (pattern) υπολογισμών και επικοινωνίας) όπως είναι το Dense Linear Algebra το οποίο περιλαμβάνει αλγορίθμους (π.χ. LU Decomposition) που επεξεργάζονται πυκνούς πίνακες (dense arrays). Για την ανάπτυξη επιταχυντών υλικού επαναδιατασσόμενης λογικής γίνεται χρήση ενός συνόλου μετροπρογράμματων, των OpenDwarfs, που είναι open-source υλοποιήσεις σε OpenCL των Dwarfs. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι οι FPGAs είναι ανταγωνιστικές με τις GPUs όσον αφορά την ταχύτητα εκτέλεσης τέτοιων αλγορίθμων.
- Δημιουργήθηκε μια grammar-based μεθοδολογία διαχείρισης δεδομένων για FPGA επιταχυντές υλικού επαναδιατασσόμενης λογικής.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράλληλα παρουσιάζονται και δημοσιεύονται σε πρακτικά διεθνών επιστημονικών συνεδρίων οι εργασίες:

i. Konstantinos Krommydas, Wu-chun Feng, Muhsen Owaida, Christos D. Antonopoulos and Nikolaos Bellas, ”On the Characterization of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Platforms”, IEEE 25th International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP), DOI:10.1109/ASAP.2014.6868650, 2014

ii. Muhsen Owaida, Christos D. Antonopoulos and Nikolaos Bellas,” A Grammar Induction Method for Clustering of Operations in Complex FPGA Designs”, IEEE 22nd Annual International Symposium on Field-Programmable Custom Computing Machines (FCCM), DOI:10.1109/FCCM.2014.62, 2014

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:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Επέκταση του Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ) για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου με στόχο σχεδίαση και υλοποίηση ενός ανοιχτού, βελτιωμένου περιβάλλοντος μετα-υπολογισμού το οποίο θα υποστηρίζει προβλήματα πολλαπλών χωρίων / πολλαπλών τελεστών (Multi-Domain / Multi-Physics – MDMP), χωρίς να απαιτούνται αλλαγές στα χαμηλά επίπεδα του FEniCS.
- Υλοποίηση και ενσωμάτωση στο FEniCS των μεθόδων Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία, της Υβριδικής Αιτιοκρατικής/ Στοχαστικής μεθόδου για προβλήματα πολλαπλών πεδίων-φυσικής, καθώς και των μεθόδων χαλάρωσης στις διεπαφές GEO και ROB.
- Αξιοποίηση σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage) για την αποδοτική επίλυση γραμμικών συστημάτων με αραιούς πίνακες.

Παράλληλα παρουσιάζεται και δημοσιεύεται σε πρακτικά διεθνούς επιστημονικού συνεδρίου η εργασία:

- A. Fevgas, P. Tsompanopoulou, and P. Bozanis, ”Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage”, 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), 02-05 Sep 2014, Chania, Crete, Greece.

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 τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα αναφέρονται:

- Στην συνδυασμό αριθμητικών σχημάτων χρονικής διακριτοποίησης τύπου IMEX Runge-Kutta και της ασυνεχούς μεθόδου dDHC (βλ. Τεχνική Έκθεση

2014 Δράσης 2.1) για την επίλυση μη-γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes). Κύριος στόχος η μείωση του υπολογιστικού κόστους χωρίς επίδραση στην ευστάθεια και τάξη σύγκλισης των μεθόδων.

- Στην απεικόνιση των dDHC εξισώσεων που προκύπτουν από γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes) σε παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές που διαθέτουν γραφικούς επιταχυντές τύπου GPU.
- Στην ανάπτυξη αλγορίθμων αναγνώρισης περιοχών λευκής και φαιάς ουσίας του εγκεφάλου από MRI απεικονίσεις. Ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση των περιοχών αυτών του εγκεφάλου καθώς και επιτυχή εισαγωγή του προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS.

Τα παραδοτέα της περιόδου περιλαμβάνουν:

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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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:

- 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.
- Ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση του πεδίου, που αναφέρεται στον υπόγειο υδροφορέα της Χερσονήσου Ηρακλείου, καθώς και εισαγωγή του προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS.

Τα αποτελέσματα της παρούσας έρευνας παρουσιάστηκαν στο συνέδριο *NumAn 2014, Conference in Numerical Analysis. Recent Approaches to Numerical Analysis. Theory, Methods and Applications*. September 2-5, 2014, Chania (διάλεξη και poster) και στο διεθνές συνέδριο CMA 2014, Kuwait, Nov. 2014.

Στο στάδιο της συγγραφής για το περιοδικό PLOSone βρίσκεται εργασία υπό τον τίτλο: P. Stratis, G. Karatzas, E. Papadopoulou, M. Zakynthinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers* (σε προετοιμασία).

Παράλληλα συντάχθηκαν οι προβλεπόμενες από το τεχνικό δελτίο εκθέσεις.

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

5 Δράση 6: Διάχυση Αποτελεσμάτων

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

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

5.1 Συμμετοχή σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια

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

ΔΙΕΘΝΗ ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΑ ΣΥΝΕΔΡΙΑ				
ΤΙΤΛΟΣ	ΤΟΠΟΘΕΣΙΑ	ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΕΙΣ	ΔΗΜΟΣΙΕΥΣΕΙΣ	ΒΡΑΒΕΙΑ
MCQMC2014	Leuven April 2014	1	1	-
IEEE FCCM 2014	Boston May 2014	1	1	-
IEEE ASAP 2014	Zurich Jun 2014	1	1	1
NumAn 2014	Chania Sept 2014	12	3	1
CMA 2014	Kuwait Nov 2014	3	-	-

5.2 Διοργάνωση Επιστημονικών Ημερίδων

Στα πλαίσια του διεθνούς επιστημονικού συνεδρίου 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014) διοργανώθηκαν δύο επιστημονικές ημερίδες (workshops) με σκοπό την διάχυση των αποτελεσμάτων του έργου σε ένα ευρύ διεθνές επιστημονικό ακροατήριο. Τα επιστημονικά αντικείμενα των ημερίδων αναφέρονται στις περιοχές

- Multi-Physics, Multi-Domain problems

- Fokas Method

με αντίστοιχους τίτλους

- Numerical methods and software platform for solving multi-physics, multi-domain problems on modern computer architectures (3 Σεπτεμβρίου 2014, 10 ομιλίες)

- Analytical and Numerical Aspects of Fokas Transform Method (2 Σεπτεμβρίου 2014, 10 ομιλίες)

Στις ημερίδες αυτές συμμετείχαν όλα τα μέλη των ΚΕΟ και ΟΕΣ του έργου με 12 διαλέξεις και 1 πόστερ. Τρεις εργασίες δημοσιεύτηκαν στα πρακτικά του συνεδρίου ύστερα από κρίση. Το βραβείο ”T.S. Papatheodorou Young Researcher Award” απενεμήθη στον Υπ.Διδ. Ν. Βιλανάκη, μέλος της ΟΕΣ του Πολυτεχνείου Κρήτης για την παρουσίαση της ερευνητικής εργασίας ”Solving Discontinuous Collocation equations for a class of brain tumor models on GPUs”.

5.3 Ανάπτυξη Ιστοσελίδας

Την Α’ εξάμηνο της τρέχουσας περιόδου, με συνεργασία όλων των ερευνητικών ομάδων του έργου, ολοκληρώθηκαν οι προδιαγραφές της τελικής μορφής της ιστοσελίδας του έργου και ξεκίνησε η κατασκευή της ύστερα από σχετική προκήρυξη. Το Β’ εξάμηνο οι εργασίες ολοκληρώθηκαν και η ιστοσελίδα στην τελική της μορφή λειτούργησε στην διεύθυνση http://www.tuc.gr/index.php?id=5209. Έκτοτε δε, ενημερώνεται συνεχώς με νέο περιεχόμενο.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Α΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.1

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που αναπτύξαμε τη τρέχουσα περίοδο ήταν η ανάπτυξη φορμαλισμού σχετικά με την επέκταση της μεθόδου dDHC για την επίλυση:

- Μη-γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών προβλήματα αρχικών και συνοριακών συνθηκών πολλαπλών πεδίων (ΠΑΣΣ-ΠΠ) στις 1+2 (μία χρόνου + δύο χωρικές) διαστάσεις, με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται μόνο στην μία από τις δύο διαστάσεις.

- Γραμμικών παραβολικών και ελλειπτικών ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις, με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται ταυτόχρονα και στις δύο διαστάσεις (εσωτερικές ”γωνίες”).

Παράλληλα, ξεκινήσαμε τη μελέτη υβριδικών μεθόδων collocation (στις 1+1 διαστάσεις) μέσω του συνδυασμού τους με Μεθόδους Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ).

1.1 Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση

Συνδυάζοντας το φορμαλισμό που αναπτύξαμε αφενός μεν για την απόδοση των collocation πινάκων μέσω τανυστινικών γινομένων και αφετέρου μεν την απόδοση των μη-γραμμικών όρων μέσω Hadamard γινομένων, προχωρήσαμε στην ανάπτυξη των μη γραμμικών εξισώσεων Collocation για προβλήματα στις 1+2 διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης όπου οι ασυνέχειες παρουσιάζονται μόνο στην μία από τις δύο διαστάσεις. Με τον τρόπο αυτό μας δόθηκε η δυνατότητα σύγκρισης και μελέτης δύο διαφορετικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου (βλ. Τεχνικές Εκθέσεις Δράση 4.2), αυτό της εκθετικής αύξησης (γραμμικό μοντέλο) και της λογιστικής αύξησης (μη-γραμμικό μοντέλο).

1.2 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες ταυτόχρονα και στις δύο χωρικές διαστάσεις

Έχοντας αναπτύξει τον απαραίτητο φορμαλισμό για γραμμικά και μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 και στις 1+2 διαστάσεις, ξεκινήσαμε την τρέχουσα περίοδο την αντιμετώπιση του γενικού προβλήματος στις 1+2 διαστάσεις το οποίο επιτρέπει οι ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης να παρουσιάζονται και στις δύο χωρικές διαστάσεις ταυτόχρονα. Με τον τρόπο αυτό παρουσιάζονται *γωνιακές*

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ασυνέχειες, δηλαδή εσωτερικές γωνίες όπου και οι μερικές παράγωγοι ως προς x και ως προς y είναι ταυτόχρονα ασυνεχείς. Βασικός στόχος της ερευνητικής δραστηριότητας ήταν η ανάπτυξη των Collocation εξισώσεων και η μελέτη της τάξης σύγκλισης της μεθόδου. Παρατηρήθηκε και μελετήθηκε η μείωση της τάξης σύγκλισης στη *γειτονιά* της γωνιακής ασυνέχειας.

1.3 Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα

Για την αποκατάσταση της τάξης σύγκλισης της Collocation μεθόδου, όταν χρησιμοποιείται για την χωρική διακριτοποίηση του γενικού προβλήματος στις 1+2 διαστάσεις το οποίο επιτρέπει οι ασυνέχειες του συντελεστή διάχυσης να παρουσιάζονται και στις δύο χωρικές διαστάσεις ταυτόχρονα, θεωρήσαμε τη συνεχή βάση των δι-κυβικών πολυωνύμων Hermite ως συναρτήσεις βάσεις και κατασκευάσαμε νέα *γενικευμένα δι-κυβικά* πολυώνυμα για να προσεγγίσουμε τον ασυνεχή συντελεστή διάχυσης του ΠΑΣΣ-ΠΠ.

1.4 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Σε συνεργασία με την ερευνητική ομάδα του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας, την τρέχουσα περίοδο, αναπτύξαμε τον απαραίτητο φορμαλισμό για την ανάπτυξη και εφαρμογή της Collocation - ΜΧΔ για την επίλυση του γραμμικού ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις. Παρατηρήσαμε ότι η νέα επαναληπτική μέθοδος συγκλίνει στην λύση που παράγει η dDHC με τετάρτης τάξης ταχύτητα.

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

2 Μεθοδολογία

2.1 Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση

Τα βασικά αποτελέσματα-εργαλεία που αναπτύξαμε στην κατεύθυνση αυτή συνοψίζονται στα παρακάτω.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Γνωρίζουμε ήδη ότι κάθε όρος της μορφής

$$\left(\frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m \partial y^n} u(x,y,t)\right)$$

με $m, n \in \mathcal{N}$, $m + n \leq 2$, μπορεί να γραφεί με χρήση του Tensor Product Collocation ως,

$$A_{mn}\boldsymbol{a} = \left(C_m \otimes C_n\right)\boldsymbol{a},$$

όπου με C_m και C_n συμβολίζουμε τους Collocation πίνακες που αντιστοιχούν στη 1-διάσταση. Συνεπώς, σε αναλογία με την περίπτωση των 1+1 διαστάσεων (βλ. Τεχνική Έκθεση Δράση 2.1 Έτος 2013), αποδείξαμε ότι αν θεωρήσουμε ένα μη γραμμικό πολυωνυμικό όρο της μορφής

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m} u(x,y,t)\right)\left(\frac{\partial^n}{\partial y^n} u(x,y,t)\right)$$

τότε αντίστοιχα μπορεί να γραφεί στην μορφή πινάκων ως εξής:

$$\left[\left(C_m \otimes C_0\right)\boldsymbol{a}\right] \circ \left[\left(C_0 \otimes C_n\right)\boldsymbol{a}\right]$$

Επιπλέον την παραπάνω πρόταση μπορούμε να την γενικέυσουμε για τον μη γραμμικό όρο

$$\left(\frac{\partial^m}{\partial x^m} u(x,y,t)\right)^k \left(\frac{\partial^n}{\partial y^n} u(x,y,t)\right)^l$$

όπου οι αντίστοιχοι πίνακες Collocation θα είναι:

$$\left[\left(C_m \otimes C_0\right)\boldsymbol{a}\right]^{\circ k} \circ \left[\left(C_0 \otimes C_n\right)\boldsymbol{a}\right]^{\circ l}$$

Ο φορμαλισμός αυτός που προέκυψε, είναι απαραίτητος για την ευκολότερη επίλυση και μελέτη των μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων στις 1+2 διαστάσεις για ομοιογενή καθώς και ανομοιογενή περιβάλλοντα.

2.2 Ανάπτυξη dDHC για γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες ταυτόχρονα και στις δύο χωρικές διαστάσεις

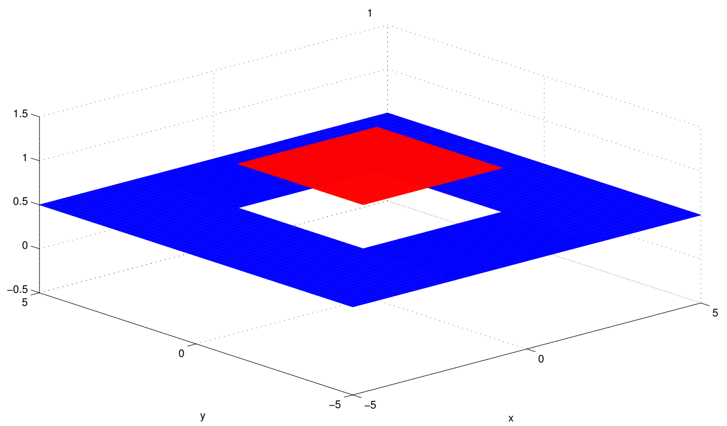
Σε συνέχεια των αποτελεσμάτων που έχουμε παράξει με την μέθοδο dDHC για γραμμικά και μη γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις το προηγούμενο διάστημα, προχωρήσαμε στη εφαρμογή της dDHC σε ΠΑΣΣ-ΠΠ που παρουσιάζουν και *γωνιακές ασυνέχειες*.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

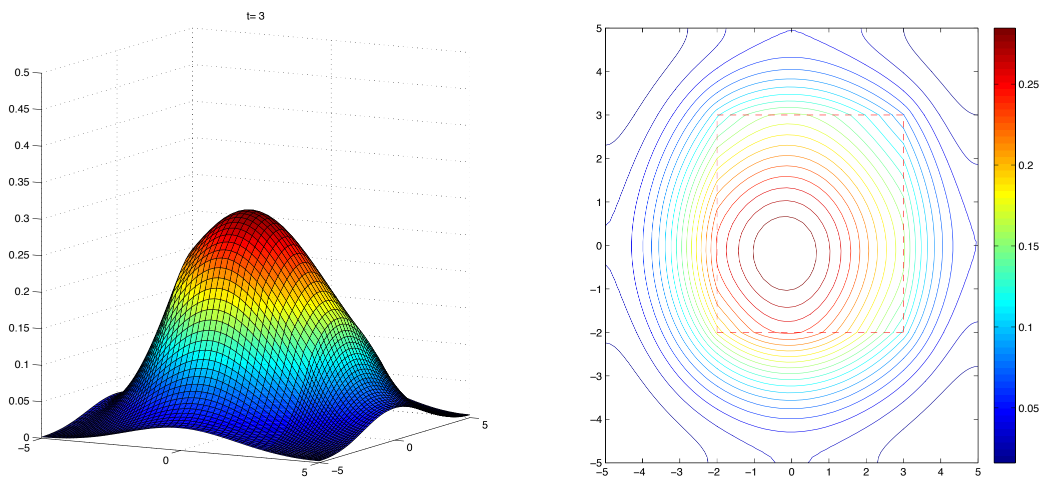
Ειδικότερα, ας θεωρήσουμε το γραμμικό μοντέλο ΠΑΣΣ-ΠΠ

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

όπου ο συντελεστής διάχυσης D όπως φαίνεται στο Σχ. (1) δημιουργεί δύο περιοχές με ορθογώνιο interface (διεπαφή) μεταξύ τους



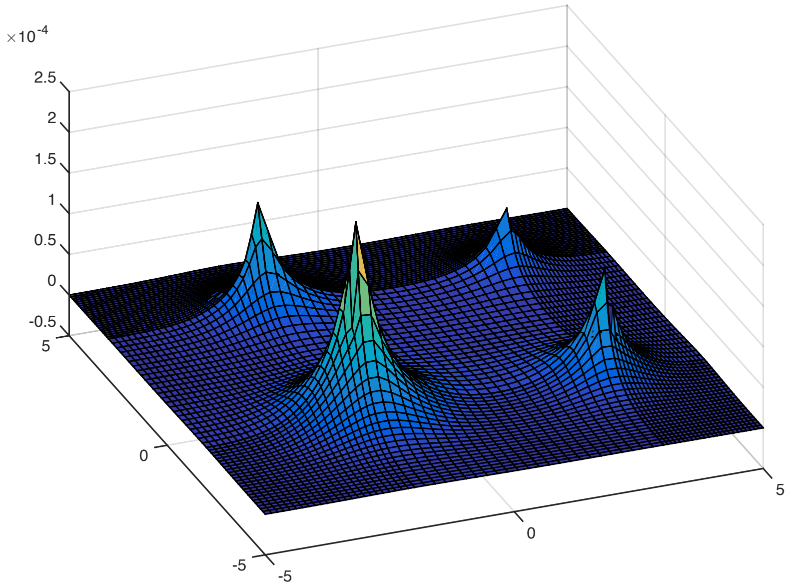
Σχήμα 1: Συντελεστής διάχυσης για το Rectangular πρόβλημα.



Σχήμα 2: Η αριθμητική λύση για ένα Rectangular πρόβλημα.

Με ιδιαίτερη προσοχή και ακολουθώντας διαφορετικές προσεγγίσεις αναπτύξαμε το αντίστοιχο collocation σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων κάνοντας χρήση και τανυστικών γινομένων σε επιλεγμένες περιοχές.

Όπως φαίνεται στο Σχ. 2 η αριθμητική λύση που παρήχθη προσεγγίζει το επιθυμητό προφίλ της ασυνέχειας της παραγώγου στο ορθογώνιο διεπαφής. Όμως, μετά από σειρά προσομοιώσεων και ανάλυσης, διαπιστώσαμε ότι η μέθοδος δημιουργεί σφάλματα χαμηλότερης τάξης σε γειτονιές των γωνιακών ασυνεχειών (Σχ. 3) με συνέπεια την απώλεια της τέταρτης τάξης σύγκλισης της μεθόδου.



Σχήμα 3: Το απόλυτο χωρικό σφάλμα της λύσης για ένα Rectangular πρόβλημα.

Η μελέτη για την αντιμετώπιση του προβλήματος της απώλειας της τέταρτης τάξης σύγκλισης μας οδήγησε στην εισαγωγή γενικευμένων συνθηκών στις περιοχές των γωνιακών ασυνεχειών οι οποίες δεν ικανοποιούνται από τα ασυνεχή δι-κυβικά Hermite πολυώνυμα. Η εισαγωγή ενός νέου γενικευμένου δι-κυβικού πολυωνύμου είναι απαραίτητη γεγονός που μας οδήγησε στην ανάπτυξη της μεθόδου που παρουσιάζουμε στην επόμενη παράγραφο.

2.3 Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα

Για την πληρέστερη παρουσίαση των αποτελεσμάτων της παραγράφου αυτής παραθέτουμε καταρχήν τα σχετικά αποτελέσματα για ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 διαστάσεις και προχωρούμε με την εισαγωγή των γενικευμένων δι-κυβικών πολυωνύμων.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Για την ανάπτυξη της μεθόδου θεωρούμε το γραμμικό πρόβλημα μοντέλο ενός ΠΑΣΣ-ΠΠ:

$$u_t = (Du_x)_x + u$$
$$x \in [a,b] = \Omega \ , \ t \in [0,T] \ , \ u(x,0) = f(x) \ , \ u_x(a,t) = u_x(b,t) = 0$$

όπου χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε επίσης ότι ο συντελεστής διάχυσης χαρακτηρίζει δύο διαφορετικές περιοχές,

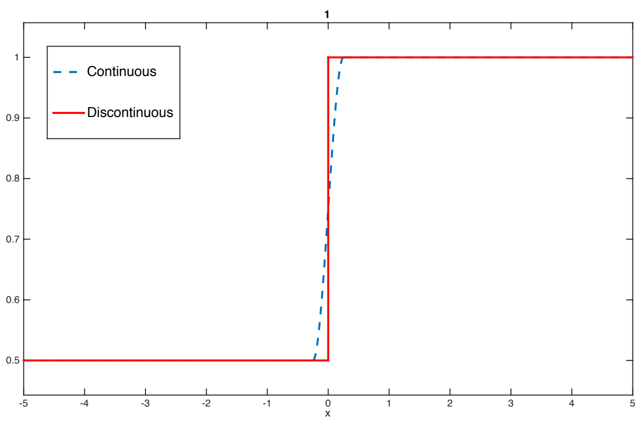
$$D = \begin{cases} \gamma & , \quad x \in [a,w] = \Omega_1 \\ 1 & , \quad x \in (w,b] = \Omega_2 \end{cases}$$

Για την επίλυση αυτού του προβλήματος χωρίς την χρήση ασυνεχών Hermite πολυωνύμων θεωρήσαμε εναλλακτικά την προσέγγιση του συντελεστή διάχυσης D από μία συνεχή συνάρτηση που κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας κατάλληλα κυβικά πολυώνυμα κοντά στα σημεία διεπαφής. Ειδικότερα, αν θεωρήσουμε για το κάθε χωρίο ομοιόμορφη διαμέριση μήκους $h_1 = (w-a)/N_1$ και $h_2(b-w)/N_2$ αντίστοιχα τότε ο συνεχής συντελεστής διάχυσης θα έχει τη μορφή:

$$\tilde{D} = \begin{cases} \gamma & , \quad x \in [a, w-h_1] \\ p(x) & , \quad x \in (w-h_1, w+h_2] \\ 1 & , \quad x \in (w+h_2, b] \end{cases}$$

όπου $p(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$ ένα κυβικό πολυώνυμο που παράγεται με τη χρήση των απαραίτητων συνθηκών:

$$p(w-h_1) = \gamma, \quad p_x(w-h_1) = 0, \quad p(w+h_2) = 1, \quad p_x(w+h_2) = 0$$



Σχήμα 4: Συνεχής (μπλε) και Ασυνεχής (κόκκινο) συντελεστής διάχυσης.

Αξίζει να σημειώσουμε ότι όσο πιο πυκνή χωρική διαμέριση χρησιμοποιήσουμε τόσο η λύση αυτής της μεθόδου προσεγγίζει την ασυνεχή της dDHC.

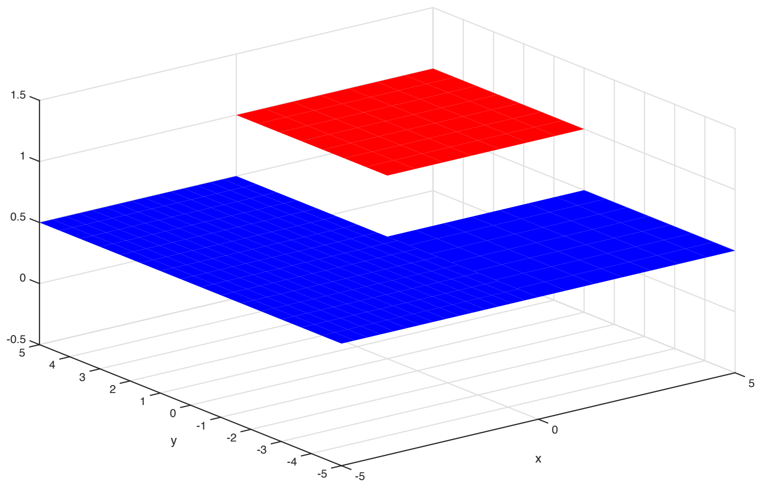
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ας θεωρήσουμε τώρα το πρόβλημα μοντέλο που περιγράφει την ανάπτυξη καρκινικού όγκου στον εγκέφαλο στις $1+2$ διαστάσεις

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla u) + u \quad , \quad u := u(x,y,t)$$
$$(x,y) \in [a,b]^2 \quad , \quad 0 \leq t \leq T$$
$$u(x,y,0) = f(x,y) \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0$$

όπου ο συντελεστής διάχυσης, που χαρακτηρίζεται από μία γωνιακή ασυνέχεια, ορίζεται ως:

$$D = \begin{cases} 1 & , \quad (x,y) \in (w,b] \times (w,b] \\ \gamma & , \quad (x,y) \notin (w,b] \times (w,b] \end{cases}$$

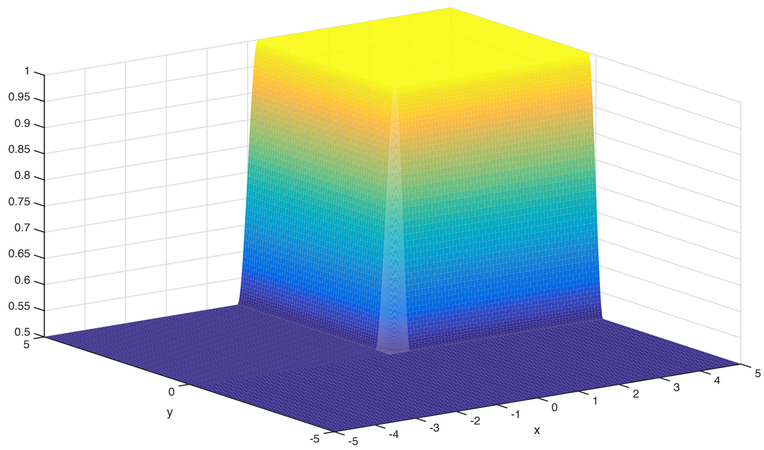


Σχήμα 5: Ο συντελεστής διάχυσης για το πρόβλημα μιας γωνίας.

Αν υποθέσουμε, για ευκολία στη παρουσίαση, ότι έχουμε ομοιόμορφη διαμέριση και στις δύο κατευθύνσεις μήκους h, τότε η γενικευμένη συνάρτηση $\tilde{D}(x,y)$ που προσεγγίζει τον συντελεστή διάχυσης D είναι της μορφής:

$$\tilde{D} = \begin{cases} 1 & , \quad (x,y) \in (w+h,b] \times (w+h,b] \\ p(x) & , \quad (x,y) \in (w-h,w+h] \times (w+h,b] \\ p(y) & , \quad (x,y) \in (w+h,b] \times (w-h,w+h] \\ c(x,y) & , \quad (x,y) \in (w-h,w+h] \times (w-h,w+h] \\ \gamma & , \quad \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

όπου τα πολυώνυμα $p(x), p(y)$ έχουν οριστεί παραπάνω για το πρόβλημα στις 1+1 διαστάσεις ενώ στη γωνία χρησιμοποιούμε ένα γενικευμένο κυβικό πολυώνυμο $c(x,y) = \sum_{i=0}^{i=3} \sum_{j=0}^{j=3} a_{ij} x^i y^j$ ώστε να δημιουργήσουμε μια προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή όπως φαίνεται στο σχήμα παρακάτω Αξίζει να σημειώ-



Σχήμα 6: Συνεχής συντελεστής διάχυσης.

σουμε ότι, με τη μέθοδο αυτή, οι πίνακες collocation που συμμετέχουν στο αντίστοιχο σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων παράγονται με χρήση τανυστικών γινομένων και η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει τετάρτη.

2.4 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Για λόγους σύγκρισης, αναπτύσσουμε την HC-IR στο πρόβλημα μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε και στην προηγούμενη παράγραφο στις 1+1 διαστάσεις. Ειδικότερα,

Ασυνεχές ΠΑΣΣ-ΠΠ

$$u_t = (Du_x)_x + u \tag{1}$$

$$x \in [a,b] = \Omega \ , \ t \in [0,T] \ , \ u(x,0) = f(x) \ , \ u_x(a,t) = u_x(b,t) = 0$$

$$D = \begin{cases} \gamma & , \quad x \in [a,w] = \Omega_1 \\ 1 & , \quad x \in (w,b] = \Omega_2 \end{cases} \quad \text{, για } \ w \in (a,b)$$

Υπενθυμίζουμε ότι οι συνθήκες συνέχειας που προκύπτουν από την παραβολική φύση του ΠΑΣΣ-ΠΠ και πρέπει να ικανοποιεί η μέθοδός μας είναι οι:

$$\lim_{x\to w^-} Du_x(x,t) = \lim_{x\to w^+} Du_x(x,t) \Longleftrightarrow \gamma u_x(w^-,t) = u_x(w^+,t)$$

και

$$\lim_{x\to w^-} u(x,t) = \lim_{x\to w^+} u(x,t) \Longleftrightarrow u(w^-,t) = u(w^+,t)$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η HC-IR σε αντίθεση με την dDHC δεν λύνει ένα ενιαίο πρόβλημα πολλαπλών πεδίων, αλλά το διαιρεί σε ανεξάρτητα προβλήματα και χρησιμοποιεί τα σημεία διεπαφής για να παράγει τις συνοριακές συνθήκες ανάμεσα σε αυτά. Συνεπώς, για την ανάπτυξη της μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε τα συνεχή πολυώνυμα Hermite και θεωρήσαμε τις συνθήκες συνέχειας στις διεπαφές ως εσωτερικές συνοριακές συνθήκες των προβλημάτων. Ειδικότερα, η μέθοδος που αναπτύξαμε ανήκει στην κατηγορία two step AVE methods, και μπορούμε να την περιγράψουμε αλγοριθμικά για προβλήματα με δύο περιοχές ως εξής:

1. Για $k = 0, \ldots$
2. Χωρίζουμε το χωρίο μας Ω σε δύο υποχωρία Ω_1, Ω_2 και διαλέγουμε τυχαία αρχικά $u_1^{(0)}, u_2^{(0)}$ για την λύση κάθε υποχωρίου.
3. $g_1 = \beta_1 \left.\frac{du_1^{(2k)}}{dx}\right|_{x=w} + \frac{1-\beta_1}{\gamma} \left.\frac{du_2^{(2k)}}{dx}\right|_{x=w}$, $g_2 = \gamma g_1$
4. Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_1 με $u_x(a,t) = 0,\ u_x(w,t) = g_1$ και
   Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_2 με $u_x(w,t) = g_2,\ u_x(b,t) = 0$
5. $h_1 = \alpha_1 \left. u_1^{(2k+1)}\right|_{x=w} + (1-a_1) \left. u_2^{(2k+1)}\right|_{x=w}$, $h_2 = h_1$
6. Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_1 με $u_x(a,t) = 0,\ u(w,t) = h_1$ και
   Λύνουμε το (ΑΠΣΤ) στο Ω_2 με $u(a,t) = h_2,\ u_x(b,t) = 0$.
7. Κριτήριο Τερματισμού
8. Τέλος Για

Η μέθοδος συγκλίνει επαναληπτικά στην ασυνεχή λύση της dDHC με μικρό αριθμό βημάτων και τερματίζει όταν η νέα λύση που παράγει είναι πολύ κοντά στην προηγούμενη λύση ($||u^{(2k+1)} - u^{(2k-1)}||_2 \leq tol$).

2.5 Γενικευμένοι Συντελεστές Διάχυσης

Η αντιμετώπιση ΠΑΣΣ-ΠΠ, με συντελεστή διάχυσης $D(x)$ να ορίζεται μέσω γενικευμένων συνεχών συναρτήσεων με ασυνεχή παράγωγο σε ένα πεπερασμένο αριθμό σημείων του πεδίου ορισμού, είναι άμεση και αντιμετωπίζεται μέσω του φορμαλισμού που έχουμε ήδη αναπτύξει. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε ΠΑΣΣ-ΠΠ μοντέλο:

$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + c \ , \quad x \in [a,b] \ , \quad t \geq 0 \\ c_x(a,t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b,t) = 0 \\ c(x,0) = f(x) \end{cases} \tag{2}$$

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

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

όπου ο συντελεστής διάχυσης ορίζεται ως:

$$D = \begin{cases} D_1(x) \quad , \quad a \leq x \leq w \\ D_2(x) \quad , \quad w < x \leq b \end{cases}$$

με $D_1(x)$ και $D_2(x)$ παραγωγίσιμες συναρτήσεις στο πεδίο ορισμού τους. Και στην περίπτωση αυτή, οι συνθήκες συνέχειας, που η παραβολική μορφή του προβλήματος επιβάλλει στο σημείο διεπαφής $x = w$, έχουν τη μορφή:

$$[u] := u^+ - u^- = 0 \; , \tag{4}$$

$$[Du_x] := D^+ u_x^+ - D^- u_x^- = 0 \; , \tag{5}$$

όπου $u^+ := \lim_{x \to w^+} u(x)$ και $u^- := \lim_{x \to w^-} u(x)$. Παρατηρώντας τώρα ότι η συνθήκη (5) γράφεται ως

$$\lim_{x \to w^+} D_2(x) u_x = \lim_{x \to w^-} D_1(x) u_x \tag{6}$$

και επομένως και ως

$$\lim_{x \to w^+} u_x = \gamma \lim_{x \to w^-} u_x \quad , \gamma := \frac{D_1(w)}{D_2(w)} \quad (D_2(w) \neq 0) \tag{7}$$

καθίσταται σαφές ότι ο φορμαλισμός της μεθόδου dDHC, που έχουμε αναπτύξει για την περίπτωση των step συναρτήσεων και συμπεριλάβει στις προηγούμενες τεχνικές εκθέσεις, ισχύει και στη γενικότερη περίπτωση.

3 Αποτελέσματα

3.1 Ανάπτυξη dDHC για μη-γραμμικά ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+2 διαστάσεις με ασυνέχειες μόνο σε μία διάσταση

Θεωρούμε την εξίσωση

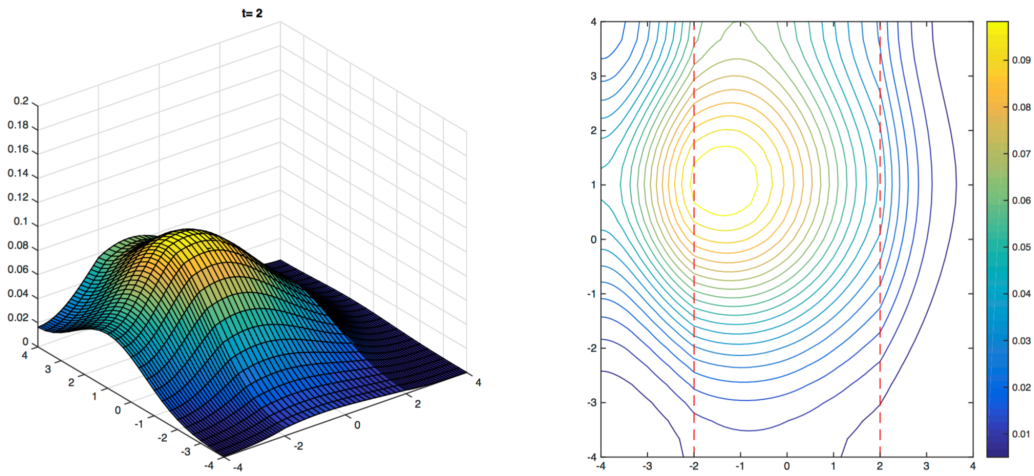
$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) \quad , \quad (x,y) \in [-4,4]^2 \; , \quad t \geq 0 \\ \\ \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \quad \text{και} \quad c(x,y,0) = f(x) \end{cases} \tag{8}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

με

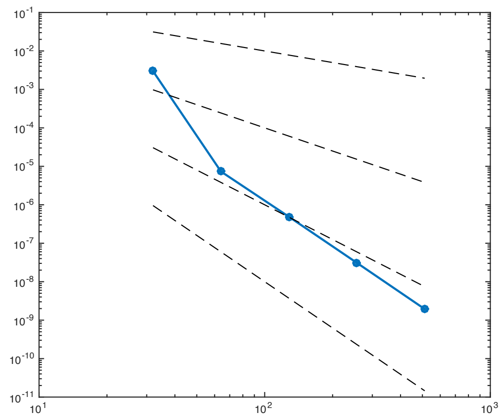
$$D = \begin{cases} \gamma & , \quad (x,y) \in [-4,-2) \cup [-4,4] \\ 1 & , \quad (x,y) \in [-2,2) \cup [-4,4] \\ \gamma & , \quad (x,y) \in [-2,4) \cup [-4,4] \end{cases}$$

Η λύση της εξίσωσης στον τελικό χρόνο είναι:



Σχήμα 7: Η αριθμητική λύση της μη γραμμικής εξίσωσης στις 2+1 διαστάσεις.

και η τάξη σύγκλισης της μεθόδου διατηρείτε στο 4, όπως φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα



Σχήμα 8: Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.2 Προσέγγιση του ασυνεχούς συντελεστή διάχυσης με γενικευμένα δι-κυβικά πολυώνυμα

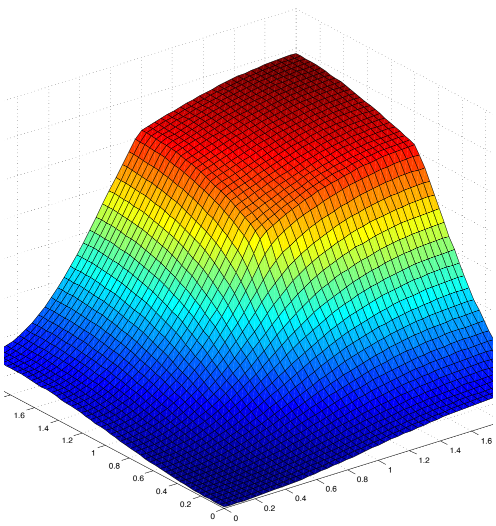
Ας θεωρήσουμε το πρόβλημα μοντέλο:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla\left[D\nabla(u)\right] \quad &, \quad u := u(x,y,t) \\
(x,y) \in [0,2]^2 \quad &, \quad 0 \leq t \leq 2 \\
u(x,y,0) = f(x,y) \quad &, \quad \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0
\end{aligned}
$$

με συντελεστή διάχυσης:

$$
D = \begin{cases} 1 & , \quad (x,y) \in (1,2] \times (1,2] \\ \gamma & , \quad (x,y) \notin (1,2] \times (1,2] \end{cases}
$$

Η επίλυση της εξίσωσης με τον Συντελεστή Διάχυσης $\tilde{D}$, τον οποίο έχουμε περιγράψει στην Μεθοδολογία της μεθόδου παραπάνω μας οδηγεί στην αριθμητική λύση που φαίνεται στο Σχ. (9), η οποία φαίνεται να προσεγγίζει σωστά το αναμενόμενο προφίλ στις περιοχές διεπαφής.



Σχήμα 9: Η αριθμητική λύση με τον γενικευμένο δι-κυβικό συντελεστή διάχυσης.

Τέλος, στον Πίνακα (1) φαίνεται το απόλυτο σφάλμα, η τάξη σύγκλισης καθώς και ο υπολογιστικός χρόνος της συνολικής υλοποίησης της μεθόδου.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

(N_x, N_y)	Error	O.o.c.	Time
$(16, 16)$	7.20e-03	-	1.58
$(32, 32)$	7.77e-06	9.85	6.03
$(64, 64)$	4.81e-07	4.01	46.64
$(128, 128)$	2.97e-08	4.01	465.33

Πίνακας 1: Πίνακας Αριθμητικών Αποτελεσμάτων για την μέθοδο κυβικής προσέγγισης του Συντελεστή Διάχυσης.

3.3 Ανάπτυξη Υβριδικής Collocation - ΜΧΔ (HC-IR) μεθόδου στις 1+1 διαστάσεις

Θεωρούμε την παραβολική εξίσωση

$$u_t = (Du_x)_x + u \tag{9}$$
$$x \in [-5, 5] = \Omega \ , \ t \in [0, 2] \ , \ u(x, 0) = f(x) \ , \ u_x(-5, t) = u_x(5, t) = 0$$

για ένα πρόβλημα δύο περιοχών που περιγράφεται απο τον συντελεστή διάχυσης,

$$D = \begin{cases} \gamma & , \quad x \in [-5, -3] = \Omega_1 \\ 1 & , \quad x \in (-3, 5] = \Omega_2 \end{cases}$$

Η λύση που παράξαμε με την μέθοδο Hermite Collocation - Interface Relaxation φαίνεται στο Σχ. (10) με μπλε διακεκομμένη γράμμη, σε σύγκριση με την λύση της dDHC (κόκκινη συνεχόμενη γραμμή). Επιπλέον, αφού θεωρήσαμε το σφάλμα

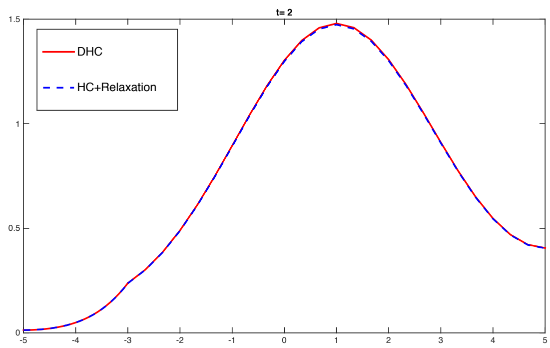
$$\mathcal{E}_i = \frac{U^i_{dhc} - U^i_{rel}}{U^i_{dhc}}$$

αποδείξαμε ότι η τάξη σύγκλισης της μεθόδου HC-IR ώς προς την λύση της dDHC παραμένει τετάρτη (βλ. Πίνακα (2)).

h	$Error$	$O.o.c$
1/4	3.70e-03	-
1/8	1.68e-06	11.10
1/16	1.05e-07	3.99
1/32	6.57e-09	4.00
1/64	4.11e-10	3.99

Πίνακας 2: Πίνακας Αριθμητικών Αποτελεσμάτων για την μέθοδο HC-IR.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 10: Υβριδική Hermite Collocation με χρήση Relaxation.

3.4 Γενικευμένοι Συντελεστές Διάχυσης

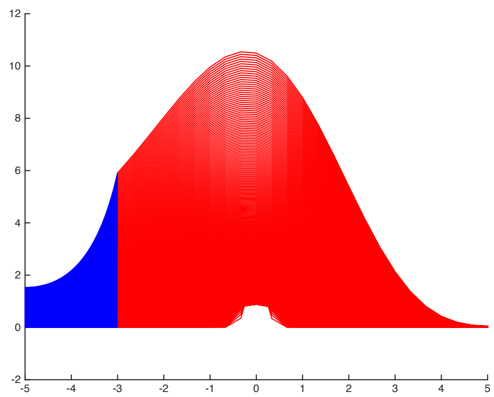
Ας θεωρήσουμε το πρόβλημα,

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x \quad , \quad x \in [-5,5] \;, \quad = 4 \\ u_x(-5,t) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(5,t) = 0 \quad . \\ u(x,0) = f(x) \end{cases} \tag{10}$$

με γραμμικούς συντελεστές διάχυσης σε δύο υποπεριοχές του χωρίου,

$$D = \begin{cases} -0.35x - 0.85 & , \quad -5 \leq x \leq -3 \\ -0.08x + 0.53 & , \quad -3 < x \leq 5 \end{cases}$$

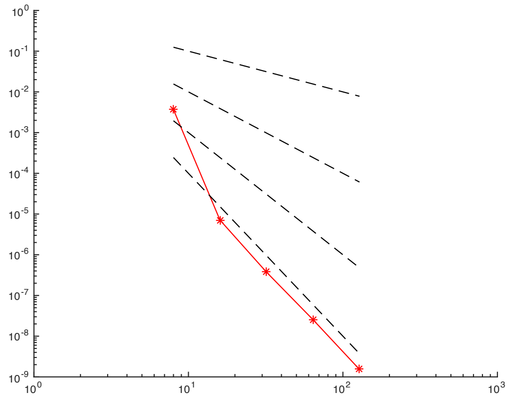
Στο Σχ. 11 καθίσταται εμφανής η ασυνέχεια της λύσης στο σημείο διεπαφής καθώς και η επίδραση του γραμμικού συντελεστή διάχυσης σε κάθε περιοχή αντίστοιχα.



Σχήμα 11: Λύση προβλήματος με γραμμικό συντελεστή διάχυσης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Επίσης, όπως μπορεί κανείς εύκολα να παρατηρήσει στο Σχ. 12, η τάξη σύγκλισης της μεθόδου παραμένει τετάρτη.



Σχήμα 12: Τάξη σύγκλισης της dDHC μεθόδου.

4 Παραδοτέα

- Ανάπτυξη λογισμικού σε προγραμματιστικό περιβάλλον MATLAB.
- Η παρούσα τεχνική έκθεση.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα ερευνητική δραστηριότητα 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. Για την ανάπτυξη της μεθόδου HC-IR συνεργαστήκαμε και με τα μέλη της (ΚΕΟ2) καθ. Μ. Βάβαλη και Αν.καθ. Γ. Τσομπανοπούλου.

6 Μελλοντικές Δράσεις

Έχοντας ως σκοπό την ολοκλήρωση του συνολικού στόχου του προγράμματος, οι μελλοντικές ενέργειες που προγραμματίζουμε στα πλαίσια της παρούσας δράσης περιλαμβάνουν:

- Ολοκλήρωση της ανάπτυξης της dDHC μεθόδου για γενικευμένα ΠΑΣΣ-ΠΠ στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Απεικόνιση της dDHC μεθόδου σε παράλληλες αρχιτεκτονικές CPU-GPU
- Συγγραφή των αποτελεσμάτων για δημοσίευση σε επιστημονικά περιοδικά και διεθνή συνέδρια.

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 three-dimensional 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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[12] Fisher RA *The wave of advance of advantageous genes*, Ann. Eugen., **7**, 255-369, 1937

[13] Gottlieb S, Shu CW and Tadmor E *Strong Stability-Preserving High-Order Time Discretization Methods*, SIAM Num. Anal., **43**, 89-112, 2001

[14] Gottlieb S and Shu CW *Total variation diminishing Runge-Kutta schemes*, Mat. Comp., **67**, 73-85, 1998

[15] Kolmogorov AN, Petrovsky IG and Piskunov NS *Investigation of the equation of diffusion combined with increasing of the substance and its application to a biology problem*, Bull. Moscow State Univ. Ser. A: Math. and Mech., **1(6)**, 1-25, 1937

[16] Hairer E *Unoconditionally stable explicit methods for parabolic equations*, Numer. Math., **35**, 57-68, 1980

[17] Hengeveld R *Dynamics of Biological Invasions*, Chapman and Hall, London, 1989

[18] A. R. Mitchell, D.F. Griffiths “The Finite Difference Method in Partial Differential Equations, ” *John Willey & Sons*, 1980.

[19] Murray JD *Mathematical Biology*, Springer, Berlin, 1989

[20] M.G. Papadomanolaki ”The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations”, *PhD Thesis*, Technical University of Crete, 2012 (in Greek)

[21] Petrovskii SV and Li BL *Exactly Solvable Models of Biological Invasion*, Taylor & Francis, 2010

[22] Ruuth S and Spiteri R *Two barriers on strong-stability-preserving time discretization methods*, J. Scientific Computation, **17**, 211-220, 2002

[23] Schmitt B *Stability of implicit Runge-Kutta methods for nonlinear stiff differential equations*, BIT, **28**, 884-897, 1988

[24] Shu CW *Total-variation-diminishing time discretizations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **9**, 1073-1084, 1988

[25] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[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.

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Β΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Η Δράση 2.2 (*Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές - ΜΧΔ*) για το 2014 κύριους στόχους της έχει : (i) σειριακή υλοποίηση ΜΧΔ στο περιβάλλον του FEniCS , (ii) έλεγχο αλγορίθμων ΜΧΔ σε ελλειπτικά προβλήματα, (iii) επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε ελλειπτικά προβλήματα μέσα από πειραματικά δεδομένα, (iv) επαλήθευση παραλληλισιμότητας ΜΧΔ με παράλληλη υλοποίηση μέσα στο FEniCS, (v) έλεγχο αλγορίθμων ΜΧΔ σε παραβολικά προβλήματα.

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 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 [1]–[3] 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 [4]. Η μαθηματική ανάλυση επιτυγχάνεται κυρίως σε απλά μοντέλα φυσικής καθώς δεν είναι εφικτό να αναλυθούν σε βάθος πραγ-

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ματικά 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 [2] και περιγράφεται ως:

1. *Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν συνοριακές συνθήκες.*

2. *Επίλυση του κάθε απλού προβλήματος ΜΔΕ, ταυτόχρονα σε όλα τα υποχωρία με τις κατάλληλες συνοριακές συνθήκες.*

3. *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 χαλάρωση 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 προβλημάτων, επομένως η ανάλυση των μεθόδων απαιτεί γνώσεις μαθηματικής ανάλυσης και όχι αριθμητικής ανάλυσης [1], [3]. 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

$$L_i u_i = f_i \quad \text{στο} \quad \Omega_i \quad \text{για} \quad i = 1, \ldots, p, \tag{1}$$

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

$$G_{i,j}\left(u_i, \frac{\partial u_i}{\partial \eta_{i,j}}; u_j, \frac{\partial u_j}{\partial \eta_{j,i}}; J_1, J_2\right) = 0 \quad \text{στο} \quad \Gamma_{i,j} \equiv \Omega_i \bigcap \Omega_j, \tag{2}$$

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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 [1]–[3], [5] 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

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

Τα παραβολικά σύνθετα προβλήματα μπορούν να αντιμετωπισθούν με όμοιες τεχνικές χαλάρωσης στις διεπαφές των επιμέρους χωρίων, ανάλογα με τους όρους της ΜΔΕ (εκτός του όρου με τη παράγωγο ως προς το χρόνο, π.χ., τους όρους που αφορούν σε reaction-diffusion, advection-diffusion ΜΔΕ. Αν η δημιουργία των επιμέρους προβλημάτων έχει βασιστεί πάνω στις ιδιότητες και τα χαρακτηριστικά του χωρίου της ΜΔΕ (όπως στις ελλειπτικές ΜΔΕ), τότε ένα πιθανό σχήμα χαλάρωσης στη διεπαφή να είναι το ακόλουθο:

1. *Ορισμός αρχικών τιμών της συνάρτησης (ή και των παραγώγων) σε όλες τις διεπαφές όλων των υποχωρίων για να χρησιμοποιηθούν σαν αρχικές συνθήκες. Αυτές υπολογίζονται με βάση την αρχική συνθήκη του σύνθετου προβλήματος.*

2. *Για κάθε βήμα στο χρόνο:*

   (α΄) *Ταυτόχρονη επίλυση, για ένα βήμα στο χρόνο, όλων των επιμέρους προβλημάτων εξέλιξης σε όλα τα υποχωρία με συνοριακές συνθήκες ορισμένες από τις αρχικές συνθήκες όπως έχουν ορισθεί στο βήμα 1 και φυσικά με αρχικές συνθήκες αυτές που επιβάλλει το αρχικό πρόβλημα.*

   (β΄) *Συνδυασμός τιμών της λύσης ή/και της παραγώγου των επιμέρους προβλημάτων πάνω στις διεπαφές (όπως και στην περίπτωση των ελλειπτικών προβλημάτων), για να χρησιμοποιηθούν ως νέες συνοριακές τιμές για τη λύση στο επόμενο χρονικό βήμα. Ο συνδυασμός*

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

που εφαρμόζει η ΜΧΔ επιβάλλει τις κατάλληλες συνθήκες που πρέπει να ικανοποιεί το αρχικό σύνθετο πρόβλημα (συνέχεια, ομαλότητα, ασυνέχεια με πήδημα στη συνάρτηση/παράγωγο κλπ.).

3. *Εμφωλευμένες επαναλήψεις μπορεί να χρειαστούν ανάλογα με το πρόβλημα ΜΔΕ.*

Αυτό σχήμα αποτελεί πρόταση που χρειάζεται επιπλέον μελέτη και διερεύνηση.

2.2 Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ

Στην παράγραφο 2.1 παρουσιάσαμε τη μεθοδολογία της χαλάρωσης στις διεπαφές. Παρατηρώντας τον γενικό αλγόριθμο είναι αντιληπτό ότι η συγκεκριμένη μεθοδολογία εμπεριέχει την έννοια του παραλληλισμού. Η επίλυση των διαφορικών εξισώσεων στα επιμέρους χωρία μπορεί να πραγματοποιηθεί ταυτόχρονα ανά επανάληψη, καθώς τα επιμέρους προβλήματα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Όμοια μπορεί να αντιμετωπισθεί και η επίλυση των διεπαφών, αφού σε κάθε διεπαφή μπορούν να υπολογισθούν οι νέες τιμές ανά επανάληψη, παράλληλα και ανεξάρτητα από τις άλλες διεπαφές.

Στο συγκεκριμένο πακέτο εργασίας πραγματοποιήθηκε μελέτη της υλοποίησης της μεθόδου ROB σε κατανεμημένο περιβάλλον. Έτσι κατέστη δυνατή η επίλυση προβλημάτων μεγάλου μεγέθους, με μικρές απαιτήσεις σε υπολογιστικό χρόνο, με την εκμετάλλευση των σύγχρονων παράλληλων αρχιτεκτονικών.

Για την παραλληλοποίηση των μεθόδων βασιστήκαμε στο σχήμα παραλληλοποίησης μέσω ανταλλαγής μηνυμάτων (message passing). Ο τεμαχισμός των εργασιών (partitioning) πραγματοποιήθηκε σε επίπεδο των επιμέρους χωρίων. Στην πρώτη φάση, κάθε διεργασία επιλύει το πρόβλημα του χωρίου που της αντιστοιχεί. Στη συνέχεια, οι διεργασίες που είναι υπεύθυνες για τις επιμέρους διεπαφές επικοινωνούν μεταξύ τους για την ανταλλαγή των τιμών στα σημεία των διεπαφών, ανανεώνουν τις τιμές των σημείων και συνεχίζουν με την επόμενη επανάληψη. Το συγκεκριμένο σχήμα προσφέρει αρκετή ευελιξία σχετικά με τον τεμαχισμό των διεργασιών ενώ παράλληλα διατηρεί και μικρό το κόστος που απαιτείται για επικοινωνία.

Για την υλοποίηση των παράλληλων μεθόδων χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό RabbitMQ μέσα από το περιβάλλον του FEniCS. Εφαρμόσαμε την υλοποίηση σε ένα πρόβλημα-μοντέλο με τρία χωρία (τόσο με ομοιόμορφη όσο και με μη ομοιόμορφη διαμέριση των χωρίων) και έγινε σύγκριση με την παράλληλη υλοποίηση της μεθόδου GEO.

Ταυτόχρονα, μελετήσαμε την παραλληλοποίηση των ΜΧΔ σε cloud περιβάλλοντα. Συγκεκριμένα, μελετήσαμε τη μέθοδο GEO, και με όμοιο τρόπο μπορεί η μελέτη να επεκταθεί και σε άλλες μεθόδους. Το κύριο χαρακτηριστικό της μεθοδολογίας της χαλάρωσης στις διεπαφές, είναι η δημιουργία μεγάλου πλήθους

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

εργασιών, με πιθανή ανομοιογένεια στα επιμέρους χαρακτηριστικά όπως για παράδειγμα το μέγεθος του χωρίου και η μέθοδος διακριτοποίησης του, η μέθοδος επίλυσης της διαφορικής εξίσωσης, το πλήθος των διεπαφών ανά επιμέρους πρόβλημα, οι μέθοδοι αντιμετώπισης των διεπαφών κλπ. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, τα επιμέρους αυτά προβλήματα (είτε είναι επίλυση των επιμέρους διαφορικών προβλημάτων είτε είναι επίλυση προβλημάτων διεπαφών) μπορούν να αντιμετωπισθούν ταυτόχρονα ανά επανάληψη. Άρα η μεθοδολογία της χαλάρωσης στις διεπαφές δημιουργεί (μεγάλο) πλήθος ανομοιόμορφων (ή μη) εργασιών που εκτελούνται ταυτόχρονα και επικοινωνούν μεταξύ τους συχνά (ανά επανάληψη) ενώ ο όγκος των δεδομένων της επικοινωνίας (δεδομένα στις διεπαφές) είναι αρκετά μικρότερος (κατά μια τάξη μεγέθους) από των όγκο των δεδομένων που επεξεργάζονται σε κάθε εργασία επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Τέτοιου είδους προβλήματα μπορούν αντιμετωπισθούν με πολύ αποδοτικό τρόπο σε περιβάλλοντα τύπου Cloud.

Πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζονται στην παράγραφο 3.2.

3 Αποτελέσματα

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

Το 2013 ορίσαμε το παρακάτω σετ των πειραμάτων, το οποίο και εξακολουθούμε να υποστηρίζουμε για να συγκεντρώσουμε πειρματικά αποτελέσματα που επαληθεύουν τις ιδιότητες των ΜΧΔ (GEO, ROB) Υπενθυμίζουμε ότι χρησιμοποιήσαμε ένα πρόβλημα ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων με 2 διαφορετικά χωρία που εμφανίζονται στο Σχήμα 1.

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

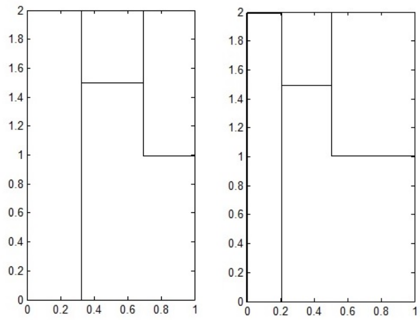
όπου $f\left(x,y\right)$ and $u^b\left(x,y\right)$ τέτοια ώστε η λύση του προβλήματος να είναι η:

$$u\left(x,y\right) = e^{y(x+4)}x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5) \qquad (3)$$

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 τεμαχισμένο χωρίο στις $x = x_1 = \frac{1}{5}$ και $x = x_2 = \frac{1}{2}$ ενώ $\gamma^2 = 2.$

Στην πρώτη προσπάθεια χρήσης του FEniCS, υλοποιήθηκαν οι μέθοδοι σειριακά, χωρίς να κάνουμε χρήση του παραλληλισμού της μεθοδολογίας ΧΔ για να επιβεβαιώσουμε τη σύγκλιση στη λύση του αρχικού γενικού προβλήματος.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



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

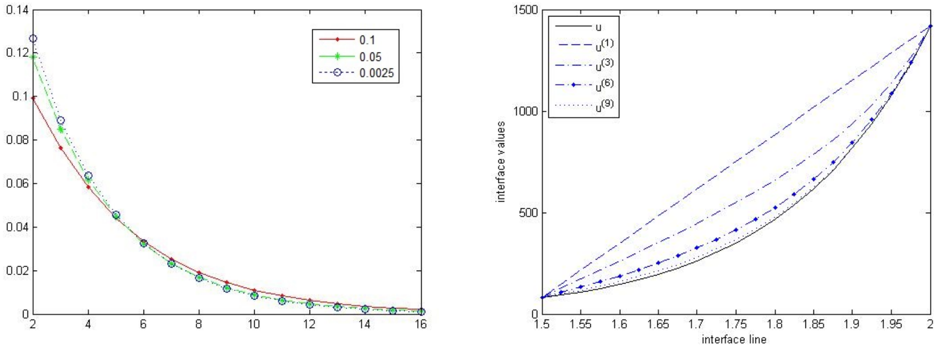
		Ομοιόμορφο πρόβλημα			Μη-Ομοιόμορφο πρόβλημα		
case	h	left	middle	right	left	middle	right
c1	0.1	4x21	4x6	4x11	3x21	4x6	6x11
c2	0.05	8x41	8x11	8x21	5x41	7x11	11x21
c3	0.025	14x81	14x21	14x41	9x81	13x21	21x41
c4	0.0125	28x161	28x41	28x81	17x161	25x41	41x81
c5	0.00625	55x321	55x81	55x161	33x321	49x81	81x161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

Πίνακας 1: Περιπτώσεις που εξετάσθηκαν με διαφορετικά βήματα διακριτοποίησης και μεγέθη πλέγματος των χωρίων για τα 3 χωρία των 2 προβλημάτων.

Το επόμενο βήμα στα πειραματικά αποτελέσματα των ΜΧΔ ήταν η επαλήθευση του παραλληλισμού που τις διέπουν, οπότε και υλοποιήθηκαν οι μέθοδοι παράλληλα μέσα στο FEniCS. Διεξήχθησαν πειράματα για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου διακριτοποίησης h, η οποία λαμβάνει ίδιες τιμές ως προς την x και την y κατεύθυνση. Τα παραγόμενα πλέγματα καταγράφονται στον Πίνακα 1, ενώ το πλήθος των σημείων στις διεπαφές είναι ίσο με το πλήθος των σημείων στη y κατεύθυνση του πλέγματος του μεσαίου χωρίου, δηλαδή αυξάνει από 6 έως 641 σημεία και στα δύο προβλήματα. Στο ομοιόμορφο πρόβλημα το αριστερό χωρίο είναι κατά πολύ μεγαλύτερο σε σχέση με τα άλλα δυο χωρία. Στο μη ομοιόμορφο πρόβλημα το μεγαλύτερο χωρίο είναι το δεξί με σημαντικά αυξημένο κόστος υπολογισμών. Οι διεπαφές και στα δυο προβλήματα έχουν το ίδιο πλήθος σημείων και κατά συνέπεια ίδιο φόρτο εργασίας.

Ο τρόπος σύγκλισης αποτυπώνεται στη Σχήμα 2. Στο Σχήμα 2α΄ εμφανίζεται η νόρμα μεγίστου των σχετικών διαφορών των διαδοχικών προσεγγίσεων της λύσης ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων στη διεπαφή $x = x_1 = \frac{1}{3}$ για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για $h = 0.1, 0.05, 0.025$. Επιβεβαιώνεται ότι οι μέθοδοι ΧΔ είναι ανεξάρτητες από την παράμετρο διακριτοποίησης h. Παραμένοντας στο ίδιο πρόβλημα και την ίδια διεπαφή, εμφανίζουμε την ακριβή λύση και τις προσεγγιστικές λύσεις του προβλήματος για τις επαναλήψεις $1, 3, 6, 10$ με

$h = 0.05$. Παρόμοια αποτελέσματα λαμβάνουμε και για την άλλη διεπαφή του ομοιόμορφου προβλήματος αλλά και για τις δυο διεπαφές του μη-ομοιόμορφου προβλήματος.



(α΄) (β΄)

Σχήμα 2: Σύγκλιση της μεθόδου GEO για το ομοιόμορφα τεμαχισμένο χωρίο. Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων (2α΄) και ακριβής και προσεγγιστική λύση στη διεπαφή (2β΄).

Στα πλαίσια εφαρμογής των ΜΧΔ σε προβλήματα εξέλιξης, θεωρήσαμε ένα μονοδιάστατο παραβολικό πρόβλημα πολλαπλών χωρίων το οποίο αποτελεί απλή προσομοίωση της συμπεριφοράς υγειών και καρκινικών κυττάρων στο εγκέφαλο. Το πρόβλημα περιγράφεται στο [6] και συνοψίζεται στη ΜΔΕ:

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

όπου

$$D(x) = \begin{cases} \gamma \;, & a \leq \; x \leq \; \omega_1 \\ 1 \;, & \omega_1 \leq \; x \leq \; \omega_2 \\ \gamma \;, & \omega_2 \leq x \leq b \end{cases} \tag{5}$$

και $\gamma = \frac{D_g}{D_w} < 1$ είναι μια σταθερά που περιγράφει τον συντελεστή διάχυσης μεταξύ γκρί και υγειών περιοχών του εγκεφάλου. Επίσης $\alpha = -5, \omega_1 = -1, \omega_2 = 1, b = 5, \gamma = 0,5$ και

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

Το πρόβλημα έχει αντιμετωπισθεί στο [6] με μη συνεχείς Galerkin Collocation μεθόδους και χρησιμοποιήσαμε αυτή την υλοποίηση για να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα από την υλοποίηση πολλαπλών συνεχών Galerkin μεθόδων με ΜΧΔ. Δεν υπάρχουν δημοσιευμένα αποτελέσματα και τα πειραματικά δεδομένα χρειάζονται περισσότερη μελέτη.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3.2 Παράλληλοι Αλγόριθμοι ΜΧΔ

Για την υλοποίηση των ΜΧΔ σε κατανεμημένο περιβάλλον χρησιμοποιήθηκε το λογισμικό RabbitMQ μέσα από το περιβάλλον του FEniCS και η μέθοδος ROB. Για την επαλήθευση της παραλληλισιμότητας των αλγορίθμων και στις δυο υλοποιήσεις χρησιμοποιήσαμε το ελλειπτικό πρόβλημα που έχουμε ορίσει στην παράγραφο 3.1.

Από τα πειραματικά αποτελέσματα, παρατηρήσαμε ότι η παράλληλες υλοποιήσεις μειώνουν σημαντικά τον χρόνο εκτέλεσης των προβλημάτων. Συγκεκριμένα ενώ στις σειριακές υλοποιήσεις σε κάθε επανάληψη το υπολογιστικό κόστος είναι το άθροισμα του πλήθους των υπολογισμών του κάθε επιμέρους προβλήματος, στην παράλληλη υλοποίηση το κόστος κάθε επανάληψης ταυτίζεται με το κόστος του μεγαλύτερου υποπροβλήματος. Στην περίπτωση ομοιόμορφων υποπροβλημάτων το υπολογιστικό κόστος ανά επανάληψη της μεθόδου είναι ίσο με το κόστος της σειριακής υλοποίησης διαιρεμένο με το πλήθος των υποπροβλημάτων.

Στον πίνακα 2 καταγράφονται οι συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO [7] μέσω της πλατφόρμας του FEniCS. Η σειριακή υλοποίηση έχει εκτελεσθεί σε υπολογιστικό κόμβο με 4 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620, 2.00GHz επεξεργαστές και 2GB RAM και η παράλληλη υλοποίηση σε 3 ίδιας ισχύος κόμβους, στην Cloud υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων του Πανεπιστημίου Πατρών (CEID-UP).
Οι χρόνοι της σειριακής εκτέλεσης αφορούν στους χρόνου υπολογισμών των τριών χωρίων για 16 επαναλήψεις. Οι χρόνοι της παράλληλης υλοποίησης αντιστοιχούν στους χρόνους υπολογισμών του μεγαλύτερου υποχωρίου μαζί με τους υπολογισμούς στις διεπαφές του χωρίου για 16 επαναλήψεις. Καθώς η παράμετρος της διακριτοποίησης μικραίνει, το υπολογιστικό κόστος αυξάνει σημαντικά ενώ το κόστος της επικοινωνίας αυξάνει κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερη. Έτσι η εξοικονόμηση χρόνου είναι εμφανής για λεπτότερες διαμερίσεις.

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7
Uniform Problem							
Serial	1.900	2.664	5.216	12.883	40.883	178.217	996.348
Parallel	3.495	4.068	6.140	13.595	39.808	154.633	723.731
Non Uniform Problem							
Serial	2.294	2.854	5.111	13.251	37.266	179.561	1057.644
Parallel	3.720	4.264	5.732	10.633	34.172	126.607	918.838

Πίνακας 2: Συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO.

Από τη υλοποίηση της κατανεμημένης ROB ενδεικτικά πειραματικά αποτελέσματα καταγράφονται στον Πίνακα 3 όπου συγκρίνονται με τους χρόνους της GEO από το περιβάλλον cloud. Οι χρόνοι περιέχουν υπολογισμούς στα υποχωρία, στις διεπαφές αλλά και το κόστος επικοινωνίας για 15 επαναλήψεις.

Προβλήματα	ROB	GEO
C1	16.004	15.495
C2	16.281	16.068
C3	17.392	18.140
C4	23.634	25.595
C5	45.456	51.808
C6	132.179	166.633
C7	899.050	735.731

Πίνακας 3: Συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της παράλληλης υλοποίησης της ROB και GEO.

Παρατηρούμε ότι οι χρόνοι και στις δύο μεθόδους στα δυο διαφορετικά περιβάλλοντα είναι ίδιας τάξης. Αυτό είναι αναμενόμενο, αφού και το κόστος των υπολογισμών και στις 2 μεθόδους ΧΔ είναι γραμμικό ως προς το πλήθος των σημείων της διεπαφής.

Η επιβάρυνση που προκαλεί η επικοινωνία, στην περίπτωση του κατανεμημένου περιβάλλοντος, δεν είναι σημαντική καθώς το μέγεθος των δεδομένων είναι κατά μια τάξη μεγέθους μικρότερο από το πλήθος των δεδομένων που επεξεργάζονται οι διεργασίες που επιλύουν τις διαφορικές εξισώσεις

Για την πειραματική αξιολόγηση της μεθόδου, χρησιμοποιήσαμε το μοντέλο-πρόβλημα με τρία χωρία που ορίσθηκε στην παράγραφο 3.1. Όπως παρατηρήσαμε, η προτεινόμενη υλοποίηση επιτυγχάνει γραμμική μείωση του χρόνου εκτέλεσης, ανάλογα με τα VMs που χρησιμοποιούνται. Ένα ακόμη πλεονέκτημα της προτεινόμενης υλοποίησης είναι η αποδοτική χρήση των διαθέσιμων πόρων μέσω της εκτέλεσης των VMs με την βέλτιστη υπολογιστική ισχύ και μνήμη για την επίλυση του αντίστοιχου προβλήματος.

4 Παραδοτέα

Τα παραδοτέα της Δράσης 2.2, σύμφωνα με το Τεχνικό Δελτίο του Έργου είναι:
Τεχνική Έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

Επιστημονικά άρθρα Στα πλαίσια της εν λόγω Δράσης παρήχθησαν οι εξής δημοσιεύσεις σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια. Ορισμένες από τις δημοσιεύσεις περιέχουν υλικό που καθορίζεται από άλλες δράσεις του έργου και αυτό είναι αποτέλεσμα της συνεργασίας μεταξύ των ερευνητικών ομάδων του έργου :

- Interface Relaxation Methods for the solution of Multi-Physics Problems, P. Tsompanopoulou, 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece. pp 260-265.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Υλοποίηση Μεθόδου GEO (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (σειριακά)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου ROB (distrib)		X	X
Υλοποίηση Μεθόδου GEO με Collocation	X	X	

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

- Serial and Parallel Implementation of an Interface Relaxation Method, A. Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothanassis, 6^{th} International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp 167-173.

Πρότυπο λογισμικό για την επαλήθευση της ορθότητας των μεθόδων:

- Προσθήκες σε πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη των μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή.

5 Συνεργασίες

Ο Πίνακας 4 περιγράφει συνοπτικά τη συνεργασία μεταξύ των ομάδων του έργου, στα πλαίσια της Δράσης 2.2 και με κύρια ομάδα δράσης την ΚΕΟ 2 (Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας).

6 Μελλοντικές Δράσεις

Κατά τη διάρκεια του 2014 δύο συγκεκριμένες μέθοδοι (ROB και GEO) χρησιμοποιήθηκαν για την επίλυση ελλειπτικών και παραβολικών προβλημάτων μοντέλων. Υπήρξε σοβαρή προσπάθεια για την χρήση ΜΔΧ στα πραγματικά προβλήματα-εφαρμογές από την Ιατρική. Στα επόμενα βήματα είναι η παραπέρα μελέτη των ΜΧΔ, τόσο σε προβλήματα μοντέλα όσο και σε πραγματικά προβλήματα και εφαρμογή τους στα προβλήματα της Ιατρικής και της Περιβαλλοντικής Φυσικής.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

7 Βιβλιογραφία

References

[1] J. Rice, P. Tsompanopoulou, and E. Vavalis, “Fine tuning interface relaxation methods for elliptic differential equations,” *Applied numerical mathematics*, vol. 43, no. 4, pp. 459–481, 2002.

[2] 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.

[3] ——, “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.

[4] 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.

[5] 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.

[6] J. E. Athanasakis, M. Papadomanolaki, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, “Discontinuous hermite collocation and diagonally implicit rk3 for a brain tumour invasion model,” in *Proceedings of the World Congress on Engineering*, vol. 1, 2013.

[7] S. L. A. Korfiati P. Tsompanopoulou, “Serial and parallel implementation of an interface relaxation method,” in *6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014)*, 2014.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Γ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.3

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

1.1 Συνοπτική παρουσίαση

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

Τίτλος Δράση 2.3: ΣΤΟΧΑΣΤΙΚΕΣ/ΝΤΕΤΕΡΜΙΝΙΣΤΙΚΕΣ ΥΒΡΙΔΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ

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

Παραδοτέα:

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

Αναλυτικότερη περιγραφή: Η βασική ερευνητική δραστηριότητα που θα αναπτυχθεί στοχεύει στην ανάπτυξη υβριδικών μεθόδων επίλυσης σύνθετων προβλημάτων ΜΔΕ οι οποίες θα αποτελούνται από τον συνδυασμό μίας στοχαστικής διαδικασίας τύπου Monte Carlo, για να κατατμήσει το αρχικό σύνθετο πρόβλημα ΜΔΕ σε ένα σύνολο πλήρως ανεξάρτητων μεταξύ τους υπο-προβλημάτων, καθώς και ντετερμινιστικών μεθόδων (πεπερασμένων στοιχείων, πεπερασμένων διαφορών) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων των υπο-προβλημάτων. Αισιοδοξούμε ότι θα μπορέσουμε να δημιουργήσουμε ένα γενικό πλαίσιο για την επίλυση σύνθετων προβλημάτων (και όχι μόνον) αλλά και ένα πρακτικό εργαλείο για την 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.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2 Στοχαστικοί/Ντετερμινιστικοί Επιλυτές για προβλήματα ελλειπτικών ΜΔΕ.

Με βάση την μελέτη πεδίου που συνοπτικά παρουσιάσαμε στην Τεχνική Έκθεση του 2013 καταλήξαμε στο παρακάτω αλγοριθμικό σχήμα.

Θεωρούμε το ακόλουθο ελλειπτικό πρόβλημα οριακής τιμής

$$Lu(x) = f(x) \;\; x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^d, \tag{1}$$

$$Bu(x) = g(x) \;\; x \in \partial\mathcal{D}, \tag{2}$$

όπου L είναι ένας ελλειπτικός διαφορικός τελεστής, B τελεστής ορίου και $d \in \mathbb{N}$.

Υποθέτουμε ότι οι συνθήκες κανονικότητας του κλειστού συνόλου $\mathcal{D}$, των τελεστές L και B και των δοθέντων συναρτήσεων $f(x)$ και $g(x)$ ικανοποιούνται. Αυτές οι συνθήκες διασφαλίζουν την ύπαρξη και μοναδικότητα της λύσης $u(x)$ στο $C_2(\mathcal{D} \cap \partial\mathcal{D})$ του προβλήματος (1)–(2). Επιπλέον, υποθέτουμε ότι το πεδίο $\mathcal{D}$ αποτελείται από (ή μπορεί να διαιρεθεί σε) $\mathcal{N}_{\mathcal{D}}$ υποπεδία, π.χ.

$$\mathcal{D} = \cup_{\mu=1}^{\mathcal{N}_{\mathcal{D}}} \mathcal{D}_\mu \tag{3}$$

και ότι L_μ και f_μ είναι περιορισμοί των L και f στο $\mathcal{D}_\mu$ ενώ B_μ και g_μ είναι περιορισμοί των B και g στο $\partial\mathcal{D}_\mu \cap \partial\mathcal{D}$.

Ορίζουμε τελικά τη διεπαφή μεταξύ των δύο υποπεδίων $\mathcal{D}_\mu$ και $\mathcal{D}_\nu$ ως

$$\mathcal{I}_{\mu,\nu} = \partial\mathcal{D}_\mu \cap (\partial\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{D}_\nu) \subset \mathbb{R}^{d-1}, \quad \mu, \nu = 1, \ldots, \mathcal{N}_{\mathcal{D}}. \tag{4}$$

Υποθέτοντας $\mu \neq \nu$,. Προφανώς θεωρούμε μόνο τις διεπαφές για τις οποίες έχουμε ότι $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \neq \emptyset$.

Είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι η ανωτέρω γενική μεθοδολογία που γίνεται ιδιαίτερα ελκυστική σε πολλές μορφές του πραγματικού κόσμου, για παράδειγμα, όταν οι περιορισμοί του ελλειπτικού τελεστή L δεν είναι οι ίδιοι σε όλα τα υποπεδία, όταν υπάρχουν ιδιόμορφα σημεία σε ορισμένους υποτομείς, όταν ο τομέας PDE $Omega$ είναι πολύπλοκος και μπορεί να απλοποιηθεί αν αποσυντεθεί σε υποτομείς ldots. Σε τέτοιες περιπτώσεις, είναι πολύ σημαντικό ότι ένας επιλέγει την πιο πρόσφορη τοπική λύσης προσαρμοσμένη σε κάθε συγκεκριμένο υποπεδίο και τους περιορισμούς των τελεστών και των λειτουργιών σε αυτό. Επιπλέον, ο παραπάνω σχεδιασμός μας προσφέρει τη δυνατότητα να υπολογίσουμε τη λύση μόνο σε επιλεγμένους υποτομείς που έχουν ιδιαίτερη σημασία για εμάς.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Data: $i_1, i_2, \ldots, i_N$: τα id των υποπεδίων στα οποία επιθυμούμε να υπολογίσουμε τη λύση.
Result: $\tilde{u}_\mu$, $\mu = i_1, \ldots, i_N$: προσεγγίσεις των περιορισμών της ακριβής λύσης u στο υποπεδίο $\mathcal{D}_\mu$, $\mu = i_1, \ldots, i_N$.

```
// PHASE I: E
;
```
while $\mathcal{I}_{\mu,\nu} \subset \cup_{j=1}^{N} \partial \mathcal{D}_{i_j}$ **do**
  Επιλογή σημείων ελέγχου $x_i \in \mathcal{I}_{\mu,\nu}, \quad i = 1, 2, \ldots, M_{\mu,\nu}$;
  Εκτίμηση λύσης u στα σημεία ελέγχου x_i χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Monte Carlo;
  Υπολογισμός της παρεμβάλουσας $u^I_{\mu,\nu}$ του $u\mu, \nu$χρησιμοποιώντας τα σημεία ελέγχου x_i;
end

```
// PHASE II: E
;
```
for $j = 1, 2, \ldots, N$ **do**
  Λύση του προβλήματος ΜΔΕ:;
    $L_{i_j} u_{i_j}(x) = f_{i_j}(x) \quad x \in \mathcal{D}_{i_j}$;
    $B_{i_j} u_{i_j}(x) = g_{i_j}(x) \quad x \in \partial \mathcal{D}_{i_j} \cap \partial \mathcal{D}$;
    $L_{i_j} u_{i_j}(x) = h_{i_j}(x) \quad x \in \mathcal{D}_{i_j}$; // $h_{i_j}(x)$ $u^I_{\mu,\nu}$s
end

Algorithm 1: The Generic Algorithm.

3 Στοιχεία Υλοποίησης

Η υλοποίησή μας βασίζεται στη μέθοδο περιπάτων σε σφαίρες [2]. Ας πούμε, ότι θέλουμε να εκτιμήσουμε το $u(x_0)$. Εάν s είναι η τρέχουσα εκτίμηση της λύσης, $B(x)$ είναι η μεγαλύτερη σφαίρα του τομέα εστιασμένη στο σημείοx, $q(y)$ είναι η δεξιά πλευρά του προβλήματος, και $a(d)$ είναι μια συνάρτηση που σχετίζεται με τη συνάρτηση του Green για τη λειτουργία του προβλήματος, που παίρνει ως είσοδο την ακτίνα του $B(x)$. Ένας περίπατος απαιτεί τους παρακάτω υπολογισμούς. βήμα i: ανάθεση το x_0 στο x; ανάθεση του 0 στο s; βήμα ii: εάν x είναι αρκετά κοντά στα όρια, πήγαινε στο βήμα v; βήμα iii: επίλεξε τυχαία ένα σημείο y μέσα στο $B(x)$, λαμβάνοντας υπόψη την πυκνότητα του $B(x)$ (περισσότερα σε αυτό στη συνέχεια); ανάθεση στο s, το άθροισμα της προηγούμενης τιμής του s, συν το γινόμενο του $q(y)$ πολλαπλασιαζόμενο με $a(d)$; βήμα iv: επίλεξε τυχαία ένα σημείο στην επιφάνεια του $B(x)$, ανάθεση του σημείου αυτού στο x; πήγαινε στο βήμα ii; βήμα v: επιστροφή s; Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται πολλές φορές, και ο μέσος όρος των εκτιμήσεων στο τέλος κάθε διαδικασίας χρησιμοποιείται ως τελική εκτίμηση.

Υπάρχει μια σημαντική διαφορά στην εφαρμογή μας, όσον αφορά την παρεμβολή μεταξύ των περιπτώσεων των 2-διαστάσεων και των 3-διαστάσεων. Στην περίπτωση των τριών διαστάσεων χρειαζόμαστε παρεμβολή 2-διαστάσεων. Δεδομένου ότι η τελευταία είναι σχετικά περίπλοκη από την άποψη του υπολογισμού κάνουμε precompute των παρεμβολών και τις τροφοδοτούμε στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων. Χρησιμοποιούμε Πολυεπίπεδη B-splines Βιβλιοθήκη Sintef του (MBA[1]). Συγκεκριμένα χρησιμοποιούμε [3]. Εδώ, επίσης, οι υπολογισμοί για κάθε παρεμβάλουσα εκτελούνται παράλληλα.

Στην περίπτωση των δύο διαστάσεων οι υπολογισμοί είναι σχετικά απλοί και έχουμε επιλέξει να μην γίνεται προεπεξεργασία των παρεμβολών. Αντ 'αυτού, έχουμε παράσχει στο λύτη των πεπερασμένων στοιχείων τις πληροφορίες που απαιτούνται για τον υπολογισμό των απαιτούμενων παρεμβολών επί τόπου. Για την παρεμβολή μίας διάστασης χρησιμοποιούμε την C ++ βιβλιοθήκη John Burkardt της spline.

Σαφώς,και στις δύο περιπτώσεις, τα σημεία που χρησιμοποιούνται για την παρεμβολή είναι αυτό που υπολογίστηκε στο προηγούμενο βήμα της Μόντε Κάρλο εκτιμήσης.

Πεπερασμένα Στοιχεία Το τελικό βήμα της διαδικασίας είναι η λύση του κάθε υποπροβλήματος (που αντιστοιχεί σε κάθε υπο-περιοχή) χρησιμοποιώντας ένα λύτη πεπερασμένων στοιχείων. Σαφώς, οι υπολογισμοί για κάθε υπο-πρόβλημα εκτελούνται παράλληλα.

[1] `http://www.sintef.no/upload/IKT/9011/geometri/MBA/mba-1.1.tgz`

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Χρησιμοποιούμε την C++ βιβλιοθήκη deal.II[2]. Αυτή η πρόσφατα αναπτυχθήσα βιβλιοθήκη και ήδη ευρέως χρησιμοποιούμενη βιβλιοθήκη [1] προσφέρει προσαρμοστικούς λύτες πεπερασμένων στοιχείων υψηλής ποιότητας για την αριθμητική επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων.[3]

4 Παραδοτέα

Παραδοτέο 2.3.1 Τεχνική έκθεση Το παρόν κείμενο.

Παραδοτέο 2.3.2 Δημοσιεύσεις Τα έως τώρα αποτελέσματα της δράσης έχουν παρουσιαστεί σε διεθνή συνέδρια.

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

5 Συνεργασίες

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

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

6 Σύνοψη και Μελλοντικές Δράσεις

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

[2] `http://www.dealii.org/`

[3] Η C++ κλάση μας `LaplaceSolve` βασίζεται στην κλάση `LaplaceProblem`, που υλοποιήθηκε στο 4ο βήμα του tutorial, στο documentation της έκδοσης 6.1.0 της βιβλιοθήκης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Αναφορές

[1] W. Bangerth, R. Hartmann, and G. Kanschat. deal.II—A general-purpose object-oriented finite element library. *ACM Trans. Math. Softw.*, 33(4):1–24, 2007.

[2] J. M. DeLaurentis and L. A. Romero. A Monte Carlo method for Poisson's equation. *J. Comput. Phys.*, 90(1):123–140, 1990.

[3] S. Lee, G. Wolberg, and S. Shin. Scattered data interpolation with multilevel B-splines. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 3(3):228–244, 1997. cited By (since 1996) 175.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Δ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 2.4

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

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 καθώς και με συνεχείς χρονικά εξαρτώμενες παραμέτρους, στις $1+1$ διαστάσεις. Παράλληλα, ολοκληρώθηκε από την ερευνητική ομάδα του καθ. Α. Φωκά η ανάπτυξη φορμαλισμού για την αντιμετώπιση της εξίσωσης θερμότητας στις δύο διαστάσεις (βλ. [2]) και επομένως ξεκίνησε η προσπάθεια επέκτασης της μεθόδου σε προβλήματα πολλαπλών πεδίων με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης.

1.1 Μέθοδος Φωκά για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+1$ διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης και χρονικά εξαρτώμενους συντελεστές

Κύριος στόχος της παρούσας ερευνητικής δραστηριότητας αποτελεί η επέκταση του μαθηματικού φορμαλισμού που έχουμε αναπτύξει αναφορικά με τη μέθοδο μετασχηματισμού Φωκά ώστε να καταστεί δυνατή η επίλυση γενικευμένων οικογενειών προβλημάτων πολλαπλών πεδίων τα οποία χαρακτηρίζονται από συντελεστές οι οποίοι μεταβάλλονται χρονικά.

1.2 Μέθοδος Φωκά για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $2+1$ διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης

Κύριος στόχος της παρούσας ερευνητικής δραστηριότητας αποτελεί η μελέτη της σχετικής βιβλιογραφίας για την ανάπτυξη της μεθόδου μετασχηματισμού Φωκά σε προβλήματα δύο χωρικών διαστάσεων ώστε να καταστεί δυνατή η ανάπτυξη κατάλληλου φορμαλισμού για την περίπτωση ενδιαφέροντος των προβλημάτων πολλαπλών πεδίων με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης. Ιδιαίτερη έμφαση φυσικά δίδεται στα πρόσφατα αποτελέσματα της συνεργαζόμενης ομάδας του Παν. Cambridge για την εξίσωση της θερμότητας στις δύο διαστάσεις.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2 Μεθοδολογία

2.1 Μέθοδος Φωκά για γραμμικά προβλήματα πολλαπλών πεδίων στις $1+1$ διαστάσεις με ασυνεχή συντελεστή διάχυσης και χρονικά εξαρτώμενους συντελεστές

Η επέκταση της μεθόδου Φωκά για την επίλυση της γενικευμένης οικογένειας προβλημάτων με χρονικά εξαρτώμενους συντελεστές βασίζεται στην χρήση κατάλληλων μετασχηματισμών και αλλαγής μεταβλητών ώστε τα προβλήματα αυτά να μετασχηματιστούν σε προβλήματα για τα οποία η αναλυτική λύση τους μέσω του μετασχηματισμού Φωκά είναι εύκολα παραγόμενη από τα μέχρι τώρα αποτελέσματά μας για προβλήματα με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές.

Πιο συγκεκριμένα, ας θεωρήσουμε το αδιάστατο Πρόβλημα Αρχικών και Συνοριακών Τιμών (ΠΑΣΤ):

$$\begin{cases} c_t = (D(x,t)c_x)_x + \rho(t)c(x,t), \quad x \in [a,b], \quad t \geq 0 \\ c_x(a,t) = 0 \quad \text{και} \quad c_x(b,t) = 0 \\ c(x,0) = f(x) := \sum_{i=1}^{M} \delta(x-\xi_i), \quad \xi_i \in (a,b) \end{cases}, \tag{1}$$

όπου ο συντελεστής διάχυσης $D(x,t)$ ορίζεται ως:

$$D(x,t) = \chi(t)\gamma_j \ , \ x \in R_j \ , \ j = 1,\ldots,n+1 \tag{2}$$

με $R_j := (w_{j-1}, w_j)$ και $a \equiv w_0 < w_1 < w_2 < \ldots < w_n < w_{n+1} \equiv b$. Το πρόβλημα θεωρείται πολλαπλών πεδίων αφού σε κάθε περιοχή R_j η μερική διαφορική εξίσωση που καλούμαστε να επιλύσουμε είναι διαφορετική, ενώ ο συντελεστής $D(x,t)$ είναι χρονικά εξαρτώμενος.

Στην κατεύθυνση μετατροπής του παραπάνω προβλήματος σε ένα ισοδύναμο πρόβλημα με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές αποδεικνύουμε τα παρακάτω λήμματα:

Λήμμα 1. *Εαν η $c(x,t)$ ικανοποιεί την εξίσωση (25) και η $u(x,t)$ ορίζεται ως:*

$$u(x,t) = e^{-R(t)}c(x,t) \ \text{ με } \ R(t) = \int_0^t \rho(s)ds \ , \tag{3}$$

τότε η $u(x,t)$ ικανοποιεί την εξίσωση

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \nabla \cdot (D(x,t)\nabla u(x,t)) \ . \tag{4}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Απόδειξη : Παρατηρώντας ότι $\dot{R}(t) = \rho(t)$ και παραγωγίζοντας την (3) ως προς t, εύκολα βλέπουμε ότι :

$$e^{-R(t)}\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = \frac{\partial}{\partial t}u(x,t) + \rho(t)u(x,t)\ . \tag{5}$$

Πολλαπλασιάζοντας τώρα την (25) με $e^{-R(t)}$ καταλήγουμε στην

$$e^{-R(t)}\frac{\partial}{\partial t}c(x,t) = \nabla\cdot(D(x,t)\nabla u(x,t)) + \rho(t)u(x,t)\ , \tag{6}$$

η οποία συνδυαζόμενη με την σχέση (5) ολοκληρώνει την απόδειξη. ■

Ανακαλώντας, την μορφή του $D(x,t)$ από την (2), μπορούμε εύκολα να δείξουμε ότι:

Λήμμα 2. *Εάν το $u(x,t)$ ικανοποιεί το Λήμμα 1 και*

$$\tau \equiv \tau(t) = \int_0^t \chi(s)ds\ , \tag{7}$$

τότε η $u(x,\tau)$ ικανοποιεί την εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}u(x,\tau) = \nabla\cdot(D(x)\nabla u(x,\tau))\ . \tag{8}$$

Απόδειξη : Γράφοντας $D(x,t) = \chi(t)D(x)$ η εξίσωση (4) του Λήμματος 1 γίνεται:

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \chi(t)\nabla\cdot(D(x)\nabla u(x,t))\ . \tag{9}$$

Το γεγονός ότι :

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \frac{d\tau}{dt}\frac{\partial}{\partial \tau}u(x,\tau) = \chi(t)\frac{\partial}{\partial \tau}u(x,\tau)\ , \tag{10}$$

ολοκληρώνει την απόδειξη. ■

Συνδυάζοντας τα δύο παραπάνω λήμματα , το ΠΑΣΤ μπορεί να γραφεί στην μορφή:

$$\begin{cases} u_\tau = (Du_x)_x, \quad x \in [a,b], \quad \tau > 0 \\ u_x(a,\tau) = 0 \quad \text{και} \quad u_x(b,\tau) = 0 \\ u(x,0) = f(x) := \sum_{i=1}^{M}\delta(x-\xi_i), \quad \xi_i \in (a,b) \end{cases}, \tag{11}$$

όπου η χρονική μεταβλητή τ έχει οριστεί στην (7), $\delta(x)$ δηλώνει τη συνάρτηση $\delta(x)$ του Dirac και $D \equiv D(x)$ είναι μια ασυνεχής συνάρτηση του x που ορίζεται ως:

$$D(x) = \gamma_j\ ,\ x \in R_j\ ,\ j = 1,\ldots,n+1\ . \tag{12}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Αν θεωρήσουμε ότι $u^{(j)}(x,\tau)$ η λύση του προβλήματος στο διάστημα $\overline{R_j} := [w_{j-1}, w_j]$, η λύση του (11) είναι η (βλ. Τεχνική Έκθεση 2013 και τις σχετικές δημοσιεύσεις):

$$\begin{aligned}
u^{(j)}(x,\tau) &= \tfrac{c_j}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jkx-k^2\tau}\widehat{f}^{(j)}(c_jk)dk \\
&- \tfrac{1}{2\pi c_j}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jk(x-w_{j-1})-k^2\tau}\left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2) + ic_jk\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)\right]dk \\
&- \tfrac{1}{2\pi c_j}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_jk(x-w_j)-k^2\tau}\left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2) + ic_jk\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)\right]dk.
\end{aligned} \tag{13}$$

όπου $\widehat{f}^{(j)}(x)$ είναι οι μετασχηματισμοί Fourier των συναρτήσεων $f^{(j)}(x)$

$$\widehat{f}^{(j)}(k) = \int_{w_{j-1}}^{w_j} e^{-ikx} f^{(j)}(x)dx, \tag{14}$$

c_j είναι συνάρτηση του γ_j

$$c_j = \gamma_j^{-\frac{1}{2}}$$

και οι 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 $j = 2,3,\ldots,n+1$
- $\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2)$ για κάθε $j = 1,2,\ldots,n$.

δίδονται από την λύση του συστήματος

$$G\widetilde{\mathbf{u}} = \widehat{\mathbf{f}}, \tag{15}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

με

$$G = \begin{bmatrix} A_1^{(1)} & A_3^{(1)} & A_4^{(1)} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_5^{(1)} & A_7^{(1)} & A_8^{(1)} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_1^{(2)} & A_2^{(2)} & A_3^{(2)} & A_4^{(2)} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_5^{(2)} & A_6^{(2)} & A_7^{(2)} & A_8^{(2)} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_1^{(n)} & A_2^{(n)} & A_3^{(n)} & A_4^{(n)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & A_5^{(n)} & A_6^{(n)} & A_7^{(n)} & A_8^{(n)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & A_1^{(n+1)} & A_2^{(n+1)} & A_3^{(n+1)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & A_5^{(n+1)} & A_6^{(n+1)} & A_7^{(n+1)} \end{bmatrix},$$

i	$A_i^{(j)}$
1	$ic_j\gamma_j k e^{-ic_jkw_{j-1}}$
2	$\gamma_{j-1}e^{-ic_jkw_{j-1}}$
3	$-ic_j\gamma_j k e^{-ic_jkw_j}$
4	$-\gamma_j e^{-ic_jkw_j}$
5	$-ic_j\gamma_j k e^{ic_jkw_{j-1}}$
6	$\gamma_{j-1}e^{ic_jkw_{j-1}}$
7	$ic_j\gamma_j k e^{ic_jkw_j}$
8	$-\gamma_j e^{ic_jkw_j}$

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

Επομένως, δεδομένου ότι η συνάρτηση (7) $\tau(t)$ είναι αμφιμονοσήμαντη, η λύση του αρχικού προβλήματος (1) δίνεται από την:

$$
\begin{aligned}
c^{(j)}(x,t) &= \tfrac{c_j}{2\pi} e^{-R\left(\tau^{-1}(t)\right)} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j kx - k^2\tau^{-1}(t)} \widehat{f}^{(j)}(c_j k)dk \\
&- \tfrac{1}{2\pi c_j} e^{-R\left(\tau^{-1}(t)\right)} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x-w_{j-1}) - k^2\tau^{-1}(t)} \left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_{j-1},k^2) + ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_{j-1},k^2)\right] dk \\
&- \tfrac{1}{2\pi c_j} e^{-R\left(\tau^{-1}(t)\right)} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ic_j k(x-w_j) - k^2\tau^{-1}(t)} \left[\widetilde{u}_x^{(j)}(w_j,k^2) + ic_j k\widetilde{u}^{(j)}(w_j,k^2)\right] dk.
\end{aligned}
\tag{16}
$$

2.2 Μέθοδος Φωκά σε $2+1$ διατάσεις

Το πρόβλημα που μελέτησε η συνεργαζόμενη ομάδα του Παν. Cambridge (Φωκάς/Μαντζαβίνος) αναφέρεται στην εξίσωση της θερμότητας στις δύο διαστάσεις με πλάγιες Neumann συνοριακές συνθήκες, και πιο συγκεκριμένα (βλ. [2]):

$$
\begin{cases}
u_t = u_{xx} + u_{yy}, \quad x,y \in (0,\infty), \quad t>0 \\
u(x,y,0) = u_0(x,y), \quad x,y \in (0,\infty) \\
\cos\beta_1 u_x(x,0,t) - \sin\beta_1 u_y(x,0,t) = F_1(x,t), \quad x \in (0,\infty), \quad t>0 \\
\cos\beta_2 u_x(0,y,t) - \sin\beta_2 u_y(0,y,t) = F_2(y,t), \quad y \in (0,\infty), \quad t>0
\end{cases}
. \tag{17}
$$

Η αναλυτική λύση του παραπάνω προβλήματος επετεύχθη μέσω της παρακάτω γενικής διαδικασίας (βλ. [2]):

1. Μετατροπή της εξίσωσης

$$u_t = u_{xx} + u_{yy}$$

στην αποκλίνουσα μορφή:

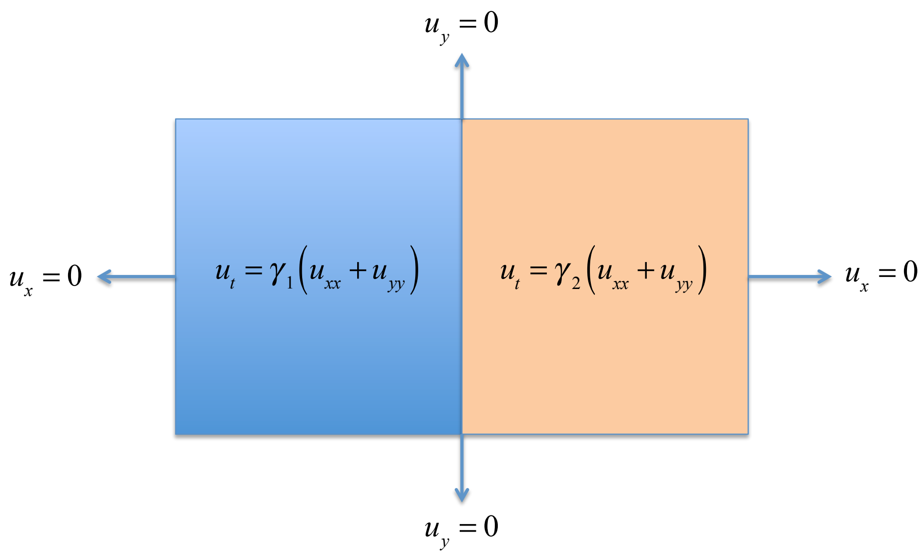
$$\left(e^{-ik_1x-ik_2y+(k_1^2+k_2^2)t}u\right)_t = \left[e^{-ik_1x-ik_2y+(k_1^2+k_2^2)t}\left(u_x+ik_1u\right)\right]_x + \left[e^{-ik_1x-ik_2y+(k_1^2+k_2^2)t}\left(u_y+ik_2u\right)\right]_y$$

2. Χρήση του θεωρήματος Gauss για την παραγωγή της *ολικής συνθήκης* (global relation).

3. Επίλυση της ολικής συνθήκης ως προς τον μετασχηματισμό Fourier της λύσης $u(x,y,t)$.

4. Χρήση αντίστροφου μετασχηματισμού Fourier και καθορισμό της λύσης $u(x,y,t)$.

Η ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης σε συνεργασία με ερευνητική ομάδα του Παν. Cambridge, μελετά την δυνατότητα επέκτασης της ανωτέρω γενικής μεθόδου σε ένα πρόβλημα δυο ορθογώνιων χωρικών πεδίων, με Neumann συνοριακές συνθήκες και κατάλληλες συνθήκες συνέχειας στην διεπαφή, όπως απεικονίζεται στο σχήμα που ακολουθεί.



Το πρόβλημα αυτό βρίσκεται σε εξέλιξη.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

3 Αποτελέσματα

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζουμε μια εφαρμογή της μεθόδου που αναπτύχθηκε σε προβλήματα ιατρικής. Η μαθηματική εξίσωση του μοντέλου διάχυσης καρκινικών όγκων στον εγκέφαλο δίνεται από τη σχέση:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot (\bar{D} \nabla \bar{c}) + \bar{\rho}\, \bar{c}, \tag{18}$$

όπου $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})$ είναι ο αριθμός των κυττάρων στη θέση $\bar{x}$ την χρονική στιγμή $\bar{t}$, το $\bar{\rho}$ παριστάνει το ποσοστό της ανάπτυξης των κυττάρων συμπεριλαμβανομένου και του πολλαπλασιασμού τους και του θανάτου τους ($0.012\ 1/day$, cf. [1]), και $\bar{D}(\bar{\mathbf{x}})$ είναι η σταθερά διάχυσης των κυττάρων στον ιστό του εγκεφάλου που δίνεται από την σχέση

$$\bar{D} = \bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} \bar{D}_g & , \ \bar{\mathbf{x}} \text{ ανήκει στην φαιά ουσία } (\bar{x} \in \bar{\Omega}_w) \\ \bar{D}_w & , \ \bar{\mathbf{x}} \text{ ανήκει στην λευκή ουσία } (\bar{x} \in \bar{\Omega}_g) \end{cases} , \tag{19}$$

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

Η παραπάνω διαφορική εξίσωση μπορεί να θεωρηθεί μέρος μια γενικότερης κατηγορίας προβλημάτων στα οποία οι παράμετροι διάχυσης και ανάδρασης εξαρτώνται και από τον χρόνο.

$$\bar{D}(\bar{x}, \bar{t}) = \bar{\chi}(\bar{t}) \bar{D}(\bar{x}) \ \text{ και } \ \bar{\rho} \equiv \bar{\rho}(\bar{t}) , \tag{20}$$

όπου $\bar{\chi}(\bar{t}) \neq 0$ και $\bar{\rho}(\bar{t}) \neq 0$ είναι συνεχείς συναρτήσεις ως προς $\bar{t}$.
Χρησιμοποιώντας τις αδιάστατες μεταβλητές (βλ. επίσης [5], [4])

$$t = \bar{\rho}_0 \bar{t} \ , \quad x = \sqrt{\frac{\bar{\rho}_0}{\bar{\chi}_0 \bar{D}_w}}\, \bar{x} \ , \quad \chi(t) = \frac{\bar{\chi}(\bar{\rho}_0 \bar{t})}{\bar{\chi}_0} \ , \quad \gamma = \frac{\bar{D}_g}{\bar{D}_w} , \tag{21}$$

όπου

$$D \equiv D(x) = \begin{cases} 1, & x \in \Omega_w \\ \gamma, & x \in \Omega_g \end{cases} , \ D(x,t) = \chi(t) D(x), \tag{22}$$

$$\rho \equiv \rho(t) = \frac{1}{\bar{\rho}_0} \bar{\rho}(\bar{\rho}_0 \bar{t}) \ , \quad f(x) = \bar{f}\left(\sqrt{\frac{\bar{\rho}_0}{\bar{\chi}_0 \bar{D}_w}}\, \bar{x} \right) , \tag{23}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

και

$$c(x,t) = \frac{\bar{\chi}_0 \bar{D}_w}{\bar{\rho}_0 N_0} \bar{c}\left(\sqrt{\frac{\bar{\rho}_0}{\bar{\chi}_0 \bar{D}_w}}\bar{x}, \bar{\rho}_0 \bar{t}\right) , \quad (24)$$

με $N_0 = \int \bar{f}(\bar{x}) d\bar{x}$ να δηλώνει την αρχικό πλήθος κακοηθών κυττάρων για $\bar{t}_0 = 0$, $\bar{\rho}_0 = \bar{\rho}(\bar{t}_0)$ και $\bar{\chi}_0 = \bar{\chi}(\bar{t}_0)$, καταλήγουμε στην αδιάστατη μορφή της διαφορικής εξίσωσης:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x,t) = \nabla \cdot (D(x,t) \nabla c(x,t)) + \rho(t) c(x,t) \ . \quad (25)$$

Χρησιμοποιώντας τον μετασχηματισμό

$$c(x,t) = e^R(t) u(x,t) \ \text{ όπου } \ R(t) = \int_0^t \rho(s) ds$$

καθώς και την μεταβλητή

$$\tau \equiv \tau(t) = \int_0^t \chi(s) ds$$

καταλήγουμε στην παρακάτω μορφή του μοντέλου:

$$\begin{cases} u_t = (D u_x)_x, \quad x \in [a,b], \quad t \geq 0 \\ u_x(a,t) = 0 \quad \text{and} \quad u_x(b,t) = 0 \\ u(x,0) = f(x) := \sum_{i=1}^{M} \delta(x - \xi_i), \quad \xi_i \in (a,b) \end{cases} , \quad (26)$$

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

Λαμβάνοντας υπόψιν 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:

$$D(x) = \gamma_j \ , \ x \in R_j \ , \ j = 1, \ldots, n+1 \quad (27)$$

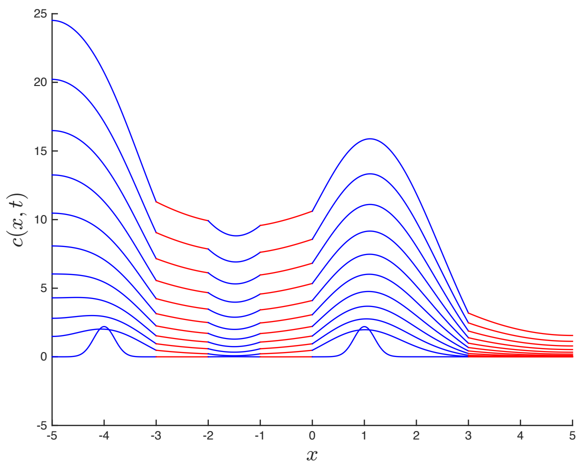
με

$$\gamma_j := \begin{cases} D_g/D_w, & \text{όταν η } R_j \text{ είναι η φαιά ουσία} \\ 1, & \text{when } R_j \text{ είναι λευκή ουσία} \end{cases} . \quad (28)$$

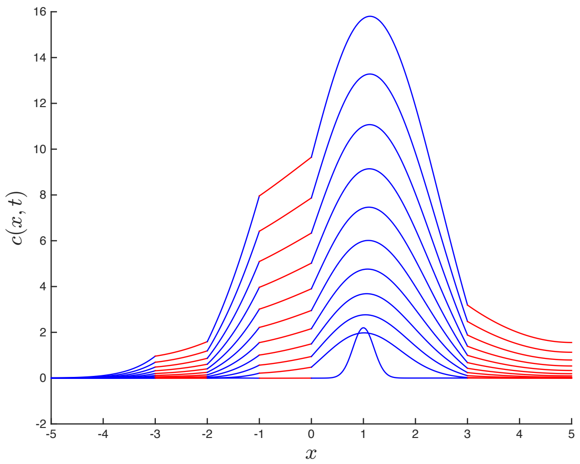
Στο μοντέλο 26 θεωρούμε $[a,b] = [-5,5]$ και εσωτερικά σημεία

$$[w_1, \ w_2 \ , w_3 \ , w_4 \ , w_5] = [-3, \ -2, \ -1, \ 0, \ 3].$$

Επίσης $\chi(t) = 0.2t$, $\gamma_j = \gamma = D_g/D_w = 0.2$ για κάθε $j = 1, 3, 5$ και $\rho = 1$.
Στο σχήμα 1, παρουσιάζεται η χρονική εξέλιξη της πυκνότητας των κυττάρων $c(x,t)$ για την περίπτωση δυο αρχικών πηγών κεντραρισμένων στα $\xi_1 = -4$ και $\xi_2 = 1$, για διάφορα χρονικά βήματα $t = t_m$ $(m = 0, 1, \ldots)$. Δηλαδή κάθε καμπύλη στο σχήμα αναπαριστά την πυκνότητα των κυττάρων σε μια δεδομένη χρονική στιγμή $c(x, t_m)$. Εντελώς ανάλογα στο σχήμα 2 παρουσιάζεται η περίπτωση μιας πηγής κυττάρων κεντραρισμένη στο $\xi_1 = 1$.



Σχήμα 1: Χρονική εξέλιξη του πυκνότητας του όγκου $c(x,t)$ για δυο πηγές.



Σχήμα 2: Χρονική εξέλιξη του πυκνότητας του όγκου $c(x,t)$ για μια πηγή.

Παρατηρείστε ότι και στις δυο περιπτώσεις η λύση είναι συνεχής και ομαλή σε

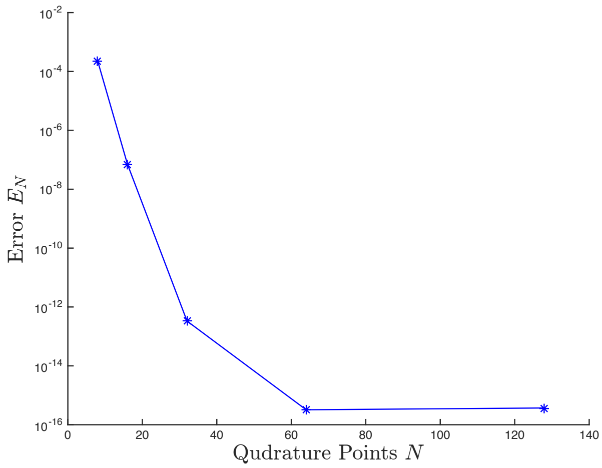
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όλο το διάστημα εκτός από τα σημεία διεπαφής όπως αναμένονταν.

Το σχετικό σφάλμα δίνεται από τον τύπο

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

όπου N δηλώνει το πλήθος των σημείων ολοκλήρωσης και u_N είναι η αντίστοιχη αριθμητική λύση. Από το σχήμα 3 παρατηρούμε την ταχεία πτώση του σφάλματος E_N.



Σχήμα 3: Το σχετικό σφάλμα E_N

4 Παραδοτέα

- Παρουσιάσεις σε διεθνή συνέδρια ως εξής:
  - Α. Σηφαλάκης, Μ. Παπαδομανωλάκη, Ε. Παπαδοπούλου, Ι. Σαριδάκης, ”Fokas transform method for classes of advection-diffusion IBVPs”, NUMAN 2014, CMA 2014
- Η παρούσα τεχνική έκθεση.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα έρευνα πραγματοποιήθηκε από την ερευνητική ομάδα του Πολυτεχνείου Κρήτης (ΚΕΟ 1) αποτελούμενη από τους καθ. Ι. Σαριδάκη, καθ. Ε.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παπαδοπούλου, Δρ. Σηφαλάκη Αναστάση, Δρ. Μ. Παπαδομανωλάκη σε συνεργασία με τον καθηγητή Α. Φωκά και τον Δ. Μαντζαβίνο του Παν. Cambridge.

6 Μελλοντικές Δράσεις

- Εφαρμογή της μεθόδου σε προβλήματα εξέλιξης καρκινικών όγκων τα οποία συμπεριλαμβάνουν και πρωτόκολλα ραδιοθεραπείας και χημειοθεραπείας που επιβάλλουν και χρονικές ασυνέχειες.
- Εξέλιξη του φορμαλισμού στις 2+1 διαστάσεις.

Αναφορές

[1] Cook J, Woodward DE, Tracqui P και Murray JD (1995) *Resection of gliomas and life expectancy*, J Neurooncol., 24, 131.

[2] D. Mantzavinos and A.S. Fokas, *The unified method for the heat equation: II. Non-separable boundary conditions in two dimensions*, European Journal of Applied Mathematics, (submitted)

[3] Kalimeris K. και Fokas AS *The Heat Equation in the Interior of an Equilateral Triangle*, Studies in Applied Mathematics, 124, 283-305 2010.

[4] 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.

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Ε΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.1

Ετήσια Τεχνική Έκθεση
Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Πίνακας Περιεχομένων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1. ΣΚΟΠΟΣ

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. Η ΚΕΟ3 έχει αναλάβει την δράση 3.1: Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud και η ΚΕΟ2 την δράση 3.2: Υλοποίησηε σε FPGAs.

Η Δράση 4 έχει σαν στόχο την δημιουργία ενός Περιβάλλοντος Επίλυσης Προβλημάτων. Η Δράση 4.1 εστιάζει στην ανάπτυξη πλατφόρμας λογισμικού, για προβλήματα πολλαπλών πεδίων καθώς και επικύρωση της για την επίλυση προβλημάτων της Περιβαλλοντικής Μηχανικής και της Ιατρικής. Στην πλατφόρμα θα ενσωματωθούν όλοι οι παράλληλοι αλγόριθμοι που υλοποιήθηκαν στην πλατφόρμα FEniCS (στη δράση 3) και θα παρέχει ταυτόχρονη πρόσβαση, μέσω Internet, σε πολλούς δυνητικούς χρήστες.

1.1. Υλοποίηση σε Clusters, Grids και Cloud

Αρχικά η υλοποίηση έλαβε χώρα 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 επιτελείται σε πολλαπλά επίπεδα. Σύμφωνα με αυτά τα συνεργατικά σχήματα εφαρμόστηκε 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 έγινε σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (web services). Στη περίπτωση αυτή το παρεχόμενο λογισμικό 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. Για το λόγο αυτό στη δράση 4.1 υλοποιήθηκε το μοντέλο Λογισμικό σαν Υπηρεσία (**SaaS** – **S**oftware **as a S**ervice), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδικτυακού γραφικού περιβάλλοντος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές. Επιπλέον, για να ληφθεί υπόψη η ποικιλομορφία των υποπροβλημάτων για ένα δοθέν πρόβλημα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλής φυσικής, η προτεινόμενη εφαρμογή έχει τη δυνατότητα να υπολογίσει και να παρέχει τα βέλτιστα VMs (σε πλήθος και δυνατότητες) σύμφωνα με τους διαθέσιμους πόρους, το μέγεθος του συνολικού προβλήματος και το μέγεθος των υποπροβλημάτων του.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1.2. Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων & Λογισμικου

Κεντρική επιδίωξη της παρούσας δράσης ήταν η σχεδίαση μιας αρχιτεκτονικής η οποία έθεσε 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 προσαρμόστηκε σε ήδη υπάρχουσα πλατφόρμα ανοικτού λογισμικού (FEniCS) και το περιβάλλον αυτό αποτελεί και την πλατφόρμα αξιολόγησης των μεθόδων επίλυσης σύνθετων ΜΔΕ και δυνητικά την επικύρωσή τους σε σημαντικά προβλήματα της Περιβαλλοντικής Μηχανικής και της Ιατρικής.

Το cloud computing είναι ένα νέο πρότυπο παράδοσης υπηρεσιών υπολογισμού στο Διαδίκτυο. Οι cloud τεχνολογίες μπορούν να παρέχουν αξιόπιστες λύσεις σε σύνθετα και μεγάλα προβλήματα ανάλυσης δεδομένων. Στον τομέα της επεξεργασίας δεδομένων από σύνθετα φυσικά συστήματα του πραγματικού κόσμου, όπως η μηχανή στροβίλων αερίου, η ατμοσφαιρική ρύπανση ή η υποβρύχια ακουστική, απαιτούνται υπολογιστικά απαιτητικές μέθοδοι επίλυσης διαφορικών εξισώσεων. Η χρησιμοποίηση cloud computing τεχνολογιών για τη γρήγορη και αξιόπιστη μαθηματική επεξεργασία των συνεχώς προερχόμενων δεδομένων από τέτοια φυσικά συστήματα μπορεί να οδηγήσει σε ολοκληρωμένα συστήματα που εξάγουν πολύτιμη γνώση.

Το cloud computing αποτελεί ένα νέο μοντέλο στον τομέα των Τεχνολογιών Πληροφορικής και Επικοινωνιών. Ο βασικός του στόχος είναι να παρέχει πρόσβαση σε όλους τους υπολογιστικούς πόρους (όπως για παράδειγμα σε εφαρμογές, δίκτυα, αποθηκευτικούς χώρους, διακομιστές, υπηρεσίες κτλ.) απευθείας από το διαδίκτυο σε συνδυασμό με την ελάχιστη προσπάθεια διαχείρισης από μεριάς τελικού χρήστη. Το cloud computing στοχεύει στον διαμοιρασμό των πόρων από τους παρόχους προς τους τελικούς χρήστες με τη μορφή υπηρεσιών. Τα κύρια χαρακτηριστικά του cloud computing που το διαφοροποιούν από άλλες τεχνικές είναι η κατά απαίτηση διάθεση υπολογιστικών πόρων, η απομακρυσμένη πρόσβαση σε αυτούς μέσω διαδικτύου και η ευελιξία των παρεχόμενων υπηρεσιών. Η ευελιξία επιτρέπει την αναβάθμιση ή υποβάθμιση των υπολογιστικών πόρων σύμφωνα με τις απαιτήσεις του τελικού χρήστη. Επιπλέον, η συνεχής αύξηση των αποθηκευτικών χώρων των δεδομένων έχει δημιουργήσει μία τεράστια ποσότητα πολύπλοκων και διάχυτων ψηφιακών δεδομένων. Η απόσπαση χρήσιμης γνώσης από μεγάλα ψηφιακά datasets απαιτεί έξυπνες και ευκόλως επεκτάσιμες υπηρεσίες ανάλυσης, εργαλεία προγραμματισμού και εφαρμογές. Έτσι το cloud computing εισάγει ένα σύνολο τεχνολογιών για την διανομή υπολογιστικών πόρων και υπηρεσιών στους τελικούς χρήστες ανάλογα με τις απαιτήσεις τους για την επιτυχή διαδικασία ανάλυσης δεδομένων. Επίσης, η

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

δυνατότητα της ελαστικότητας και της επεκτασιμότητας έχει κάνει το cloud computing να είναι μια αναδυόμενη τεχνολογία αναφορικά με τις αναλύσεις μεγάλου όγκου δεδομένων οι οποίες απαιτούν παραλληλισμό, πολύπλοκες ροές ανάλυσης και υψηλό υπολογιστικό φόρτο εργασίας.

Στη συγκεκριμένη δράση η υλοποίηση έγινε σε περιβάλλον Cloud μέσω χρήσης υπηρεσιών διαδικτύου (web services). Στη περίπτωση αυτή το παρεχόμενο λογισμικό 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. Για το λόγο αυτό στη δράση 4.1 υλοποιήθηκε το μοντέλο Λογισμικό σαν Υπηρεσία (**SaaS** – **S**oftware **as a S**ervice), που δίνει τη δυνατότητα ενός φιλικού προς το χρήστη διαδυκτιακού γραφικού περιβάλλοντος που μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο από σταθμούς εργασίας αλλά και από φορητές συσκευές.

2. Μεθοδολογία

2.1. Υλοποίηση Μεθόδων IR στη FEniCS

Η επίλυση μεγάλων και σύνθετων Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων (ΜΔΕ) είναι ένα πρόβλημα που αντιμετωπίζεται κυρίως με τεχνικές διακριτοποίησης πεδίου [1], [2]. Αυτή η προσέγγιση περιλαμβάνει την αποσύνθεση στο επίπεδο της γραμμικής άλγεβρας μετά την διακριτοποίηση του πεδίου και της εξίσωσης με την επιθυμητή μέθοδο, δηλαδή: Πεπερασμένων Διαφορών (ΠΔ) ή πεπερασμένων στοιχείων (ΠΣ). Το κύριο χαρακτηριστικό αυτών των μεθόδων είναι η μη ευελιξία για την επιλογή διαφορετικών μεθόδων για κάθε υποπεδίο του αρχικού προβλήματος. Η μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή είναι μια ενδιαφέρουσα εναλλακτική λύση [3], [4]. Εδώ, το πεδίο των ΜΔΕ αποσυντίθεται σε υποπεδία, για λόγους που προέρχονται από την φυσική ή για λόγους παραλληλισμού, και την ίδια στιγμή αρχικές μαντεψιές καθορίζονται στις διεπαφές μεταξύ των υποπεδίων. Τα υποπροβλήματα επιλύονται και νέες τιμές στις διεπαφές υπολογίζονται με συγκεκριμένες μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή (επιβάλλοντας τις σωστές συνθήκες για το πρόβλημα) επαναληπτικά έως ότου επιτευχθεί η σύγκλιση.

Περιβάλλοντα επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών που υλοποιούν τη μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή θα πρέπει να είναι ικανά να φιλοξενούν και να ενσωματώνουν μια ποικιλία υφιστάμενων επιλυτών ΜΔΕ και μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή. Αυτοί οι επιλυτές πρέπει να παρέχουν μια ελάχιστη λειτουργικότητα συμπεριλαμβανομένων των εξής: ορισμό πεδίου και ΜΔΕ, δημιουργία πλέγματος, σχήμα διακριτοποίησης, εκτίμηση της λύσης και της παραγώγου σε οποιοδήποτε σημείο του πεδίου συμπεριλαμβανομένων των ορίων / διεπαφών. Οι υφιστάμενες υλοποιήσεις έχουν διάφορα μειονεκτήματα, μεταξύ των οποίων το ότι εξαρτώνται σε μεγάλο βαθμό από πλατφόρμες πρακτόρων και την βιβλιοθήκη PELLPACK, αποκαλύπτοντας έτσι την ανάγκη μιας νέας υλοποίησης απαλλαγμένης από αυτούς τους περιορισμούς.

Στην παρούσα μελέτη υλοποιούμε μια από τις μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή, που παρουσιάστηκαν 2η Ετήσια Έκθεση Προόδου, τη geometric (GEO)

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

contraction based στη FEniCS. Η FEniCS [5] είναι μια συλλογή ελεύθερου λογισμικού για αυτοματοποιημένη, αποδοτική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Οι λόγοι για την επιλογή της FEniCS είναι, μεταξύ άλλων, ότι είναι αξιόπιστη, αποδοτική, ελεύθερη και υποσχόμενη να υποστηρίζεται και στο μέλλον. Μια παράλληλη υλοποίηση της GEO στη FEniCS με τη βοήθεια του RabbiMQ (προσανατολισμένο σε μηνύματα middleware) [6] παρουσιάζεται, επίσης. Στη συνέχεια παρουσιάζονται σύντομα η FEniCS, το RabbiMQ και ζητήματα τόσο της σειριακής, όσο και της παράλληλης υλοποίησης.

2.1.1. Υλοποίηση στη FEniCS

Σκοπεύοντας στην ενσωμάτωση της μεθόδου GEO, μαζί με άλλες μεθόδους χαλάρωσης στη διεπαφή, σε ένα ολοκληρωμένο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων που να αφορά προβλήματα πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών την υλοποιήσαμε στη FEniCS. Η FEniCS παρέχει κλάσεις και μεθόδους με τις οποίες είναι δυνατός ο καθορισμός των ιδιοτήτων των υποπεδίων του προβλήματος (γεωμετρία πεδίου, τελεστής ΜΔΕ και οριακές συνθήκες ή/και συνθήκες διεπαφών). Οι μέθοδοί της μπορούν επίσης να δημιουργήσουν ή/και να βελτιώσουν πλέγματα (τριγωνικά στοιχεία) για κάθε υποπεδίο, να επιλύσουν τα τοπικά προβλήματα ΜΔΕ και να απεικονίσουν τα υπολογισμένα αποτελέσματα για ολόκληρο το πεδίο και για τις διεπαφές. Ο προεπιλεγμένος επιλυτής στα προγράμματα της FEniCS είναι η αραιή LU αποσύνθεση, καθώς είναι ισχυρή για κάποιες χιλιάδες αγνώστους στο σύστημα εξισώσεων. Παρόλα αυτά, η αραιή LU αποσύνθεση γίνεται αργή και πολύ απαιτητική σε μνήμη για μεγάλα προβλήματα. Για αυτό το λόγο η FEniCS παρέχει εναλλακτικά και επαναληπτικές μεθόδους, όπως οι preconditioned Krylov επιλυτές, οι οποίοι είναι γρηγορότεροι και απαιτούν σημαντικά λιγότερη μνήμη. Μια πλήρης λίστα των διαθέσιμων Krylov επιλυτών και preconditioners μπορεί να βρεθεί στην τεκμηρίωση της FEniCS [5]. Στην πραγματικότητα, οι υλοποιήσεις των επιλυτών που τίθενται σε δράση εξαρτώνται από την επιλογή του πακέτου γραμμικής άλγεβρας. Η FEniCS υποστηρίζει διάφορα πακέτα γραμμικής άλγεβρας, που αποκαλούνται backends στην ορολογία της FEniCS. Το PETSc είναι το προεπιλεγμένο backend και εναλλακτικά backends που υποστηρίζονται είναι τα uBLAS, Epetra (Trilinos) και MTL4.

Για την καλύτερη κατανόηση του τρόπου με τον οποίο ένα πρόβλημα επιλύεται στη FEniCS πειραματιστήκαμε με το ακόλουθο πρόβλημα-μοντέλο, που είναι το Poisson πρόβλημα:

$$-\nabla^2 u(x) = f(x), \quad x \ in \ \Omega,$$
$$u(x) = u_0(x), \quad x \ on \ \partial\Omega.$$

Εδώ, η $u(x)$είναι η άγνωστη συνάρτηση, η $f(x)$ είναι μια ορισμένη συνάρτηση, το ∇^2 είναι ο τελεστής Laplace, το Ω είναι το χωρικό πεδίο και το $\partial\Omega$ είναι το όριο του Ω. Μια ΜΔΕ σαν αυτή, μαζί με ένα πλήρες σύνολο από οριακές συνθήκες αποτελούν ένα πρόβλημα οριακών τιμών, που πρέπει να οριστεί πλήρως πριν την επίλυσή του στη FEniCS.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.1.2. RabbitMQ

Για την παράλληλη υλοποίηση στην πλατφόρμα FEniCS χρησιμοποιήθηκε το RabbitMQ [6]. Το RabbitMQ είναι ένας ελαφρύς, αξιόπιστος, επεκτάσιμος και φορητός μεσολαβητής μηνυμάτων. Δίνει στις εφαρμογές μια κοινή πλατφόρμα για αποστολή και λήψη μηνυμάτων. Το RabbitMQ τρέχει σε όλα τα κύρια λειτουργικά συστήματα και είναι εύκολο στη χρήση. Υποστηρίζει έναν τεράστιο αριθμό από πλατφόρμες ανάπτυξης, μεταξύ των οποίων και την Python, που είναι η πλατφόρμα ανάπτυξης της FEniCS. Το RabbitMQ βασίζεται στο Advanced Message Queuing Protocol (AMQP). Το AMQP είναι ένα πρωτόκολλο μηνυμάτων που ασχολείται με εκδότες και καταναλωτές. Οι εκδότες παράγουν τα μηνύματα, οι καταναλωτές τα λαμβάνουν και τα επεξεργάζονται.

Στην παρούσα μελέτη δημιουργήθηκε ένα σύστημα κλήσης απομακρυσμένης διαδικασίας (Remote Procedure Call - RPC), βασισμένο στο RabbitMQ καθότι υπάρχει μεγάλη ανάγκη για επικοινωνία κατά τη διάρκεια της παράλληλης επίλυσης των προβλημάτων ΜΔΕ. Στη συνέχεια θα περιγράψουμε τη διαδικασία δημιουργίας ενός RPC συστήματος (που επιστρέφει Fibonacci αριθμούς): ένας πελάτης και ένας server χρησιμοποιώντας το RabbitMQ.

2.1.3. Σειριακή Υλοποίηση

Η geometric (GEO) contraction based μέθοδος υλοποιείται σαν ένα FEniCS πρόγραμμα γραμμένο στην προγραμματιστική γλώσσα Python. Η βιβλιοθήκη DOLFIN χρησιμοποιείται για την εισαγωγή κλάσεων χρήσιμων για τη δημιουργία των υποπεδίων του προβλήματος και τη δημιουργία πλεγμάτων (τριγωνικά στοιχεία) σε αυτά τα υποπεδία. Στη συνέχεια δηλώνουμε και εφαρμόζουμε τις οριακές συνθήκες, καθώς επίσης και τις αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές των υποπεδίων. Το πρόβλημα ΜΔΕ πρέπει να εκφραστεί σαν ένα παραμετρικό (variational) πρόβλημα και στη συνέχεια να οριστεί στο πρόγραμμα. Μετά τον υπολογισμό της λύσης, πραγματοποιείται και ο υπολογισμός της παραγώγου.

Η δημιουργία κατάλληλων συναρτήσεων για την λήψη των τιμών της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών (όρια των υποπροβλημάτων), ο υπολογισμός των νέων χαλαρωμένων τιμών και το πέρασμά τους πίσω στα υποπροβλήματα σαν ανανεωμένες τιμές για τις διεπαφές ήταν οι κυριότερες προκλήσεις της υλοποίησης της GEO.

2.1.4. Παράλληλη Υλοποίηση

Δεδομένου ότι η μέθοδος GEO είναι εγγενώς παραλληλίσιμη, στην παράλληλη υλοποίησή της κάθε κόμβος επιλύει ένα υποπεδίο. Οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από κάθε κόμβο (που επιλύει ένα υποπεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υποπεδία) στέλνονται σαν ένα RabbiMQ μήνυμα, έτσι ώστε η νέα επανάληψη να ξεκινήσει και στον άλλο κόμβο επίσης. Αυτό το σχήμα, που δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού των μηνυμάτων που

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας. Άρα, το μεσαίο πεδίο το επιλύει ένας client και τα άλλα δύο ένας server το καθένα. Αυτοί οι servers χειρίζονται και τις διεπαφές.

2.2. Συγκερασμός Αριθμητικών Μεθόδων & Λογισμικου

2.2.1. Σειριακή Υλοποίηση της GEO

Η geometric (GEO) contraction based μέθοδος υλοποιείται σαν ένα FEniCS πρόγραμμα γραμμένο στην προγραμματιστική γλώσσα Python. Η βιβλιοθήκη DOLFIN [7] χρησιμοποιείται για την εισαγωγή κλάσεων χρήσιμων για τη δημιουργία των υπο-πεδίων του προβλήματος και τη δημιουργία πλεγμάτων (τριγωνικά στοιχεία) σε αυτά τα υπο-πεδία. Στη συνέχεια δηλώνουμε και εφαρμόζουμε τις οριακές συνθήκες, καθώς επίσης και τις αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές των υπο-πεδίων. Το πρόβλημα ΜΔΕ πρέπει να εκφραστεί σαν ένα παραμετρικό (variational) πρόβλημα και στη συνέχεια να οριστεί στο πρόγραμμα. Μετά τον υπολογισμό της λύσης, πραγματοποιείται και ο υπολογισμός της παραγώγου.

Η δημιουργία κατάλληλων συναρτήσεων για την λήψη των τιμών της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών (όρια των υπο-προβλημάτων), ο υπολογισμός των νέων χαλαρωμένων τιμών και το πέρασμά τους πίσω στα υπο-προβλήματα σαν ανανεωμένες τιμές για τις διεπαφές ήταν οι κυριότερες προκλήσεις της υλοποίησης της GEO. Οι ανανεωμένες τιμές σε ένα σημείο της διεπαφής x υπολογίζονται ως εξής:

$$u^{(k+1)}(x) = u^{(k)}(x) - \rho\left(\frac{\partial u_L^{(k)}(x)}{\partial n} - \frac{\partial u_R^{(k)}(x)}{\partial n}\right), k = 1,2, \dots$$

όπου k είναι η επανάληψη, u είναι η υπολογισμένη λύση στο σημείο της διεπαφής x, $\frac{\partial \mathrm{u}_\mathrm{L}^{(\mathrm{k})}(\mathrm{x})}{\partial \mathrm{n}}, -\frac{\partial \mathrm{u}_\mathrm{R}^{(\mathrm{k})}(\mathrm{x})}{\partial \mathrm{n}}$ είναι οι τιμές των προς τα έξω κανονικών παραγώγων στα δύο γειτονικά υποπεδία και ρ είναι η παράμετρος χαλάρωσης που χρησιμοποιείται για να επιταχύνει τη σύγκλιση. Μια νέα επανάληψη ξεκινάει με το που περαστούν οι χαλαρωμένες τιμές των διεπαφών πίσω στα υπο-πεδία.

Πιο αναλυτικά, τμήματα του FEniCS προγράμματος που υλοποιεί τα παραπάνω παρουσιάζεται στο Παράρτημα Ι.

2.2.2. Παράλληλη Υλοποίηση της GEO

Δεδομένου ότι η μέθοδος GEO είναι εγγενώς παραλληλίσιμη, στην παράλληλη υλοποίησή της κάθε κόμβος επιλύει ένα υπο-πεδίο. Οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από κάθε κόμβο (που επιλύει ένα υπο-πεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υπο-πεδία) στέλνονται σαν ένα RabbiMQ μήνυμα, έτσι ώστε η νέα επανάληψη να ξεκινήσει και στον άλλο κόμβο επίσης. Αυτό το σχήμα, που δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού των μηνυμάτων που ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας. Άρα, το μεσαίο πεδίο το επιλύει ένας client και τα άλλα δύο ένας server το καθένα. Αυτοί οι servers

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

χειρίζονται και τις διεπαφές. Ενδεικτικά τμήματα του κώδικα δίνονται στο Παράρτημα ΙΙ.

3. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Σε αυτό το στάδιο όλοι οι αλγόριθμοι έχουν υλοποιηθεί παράλληλα στην πλατφόρμα FEniCS. Η αξιολόγηση των αλγορίθμων που υλοποιήθηκαν, για τις Δράσεις 3.1 και 4.1, παρουσιάζεται ενιαία στα επόμενα κεφάλαια.

3.1. Αξιολόγηση Αλγορίθμων

3.1.1. Πειράματα για αξιολόγηση της υλοποίησης αλγορίθμων

Για την εξέταση της ορθότητας και της απόδοσης της υλοποίησης, χρησιμοποιείται το ακόλουθο ελλειπτικό πρόβλημα:

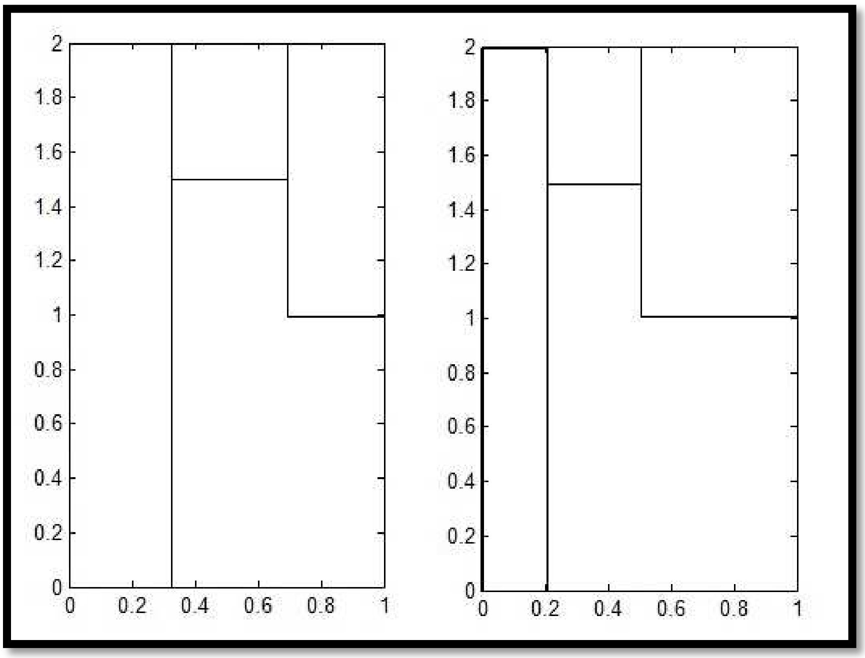
$$Lu(x,y) \equiv \nabla u(x,y) + \gamma^2 u(x,y) = f(x,y),\ \ (x,y) \in \Omega$$
$$u(x,y) = u^b(x,y),\ \ (x,y) \in \Omega$$

με $f(x,y)$ και $u^b(x,y)$ επιλεγμένα έτσι ώστε η πραγματική λύση να είναι:

$$u(x,y) = e^{y(x=4)} x(x-1)(x-0.7)y(y-0.5) \qquad (3)$$

Πιο συγκεκριμένα μελετώνται δύο διαφορετικά προβλήματα ΜΔΕ που αποτελούνται από την προηγούμενη διαφορική εξίσωση και οριακές συνθήκες και τα δύο διαφορετικά πεδία που αποτυπώνονται στην εικόνα 6.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 1: Τα πεδία του ομοιόμορφου (αριστερά) και του ανομοιόμορφου (δεξιά) προβλήματος

3.1.2. Πειράματα

Για το ομοιόμορφο πρόβλημα τα σημεία των διεπαφών είναι στα $x_1 = \frac{1}{3}$ και $x_2 = \frac{2}{3}$ και για το ανομοιόμορφο πρόβλημα στα $x_1 = \frac{1}{5}$ και $x_2 = \frac{1}{2}$ και το $\gamma^2 = 2$. Τα πειράματα εκτελούνται για διάφορες τιμές της παραμέτρου διακριτοποίησης h, η οποία έχει θεωρηθεί ίση τόσο στην κατεύθυνση x όσο και στην κατεύθυνση y. Τα προκύπτοντα μεγέθη του πλέγματος παρουσιάζονται στον πίνακα 2.

Ομοιόμορφο πρόβλημα				
Περίπτωση	**H**	**Αριστερό υποπεδίο**	**Μεσαίο υποπεδίο**	**Δεξί υποπεδίο**
Π1	**0.1**	**4x21**	4x6	4x11
Π2	**0.05**	**8x41**	8x11	8x21
Π3	**0.025**	**14x81**	14x21	14x41
Π4	**0.0125**	**28x161**	28x41	28x81
Π5	**0.00625**	**55x321**	55x81	55x161
Π6	**0.003125**	**108x641**	108x161	108x321
Π7	**0.0015625**	**214x1281**	214x321	214x641

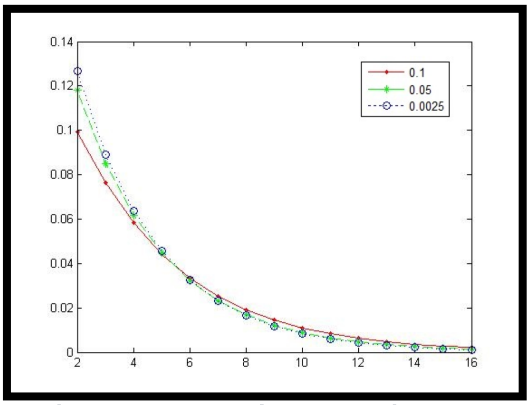
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ανομοιόμορφο πρόβλημα				
Περίπτωση	**H**	**Αριστερό υποπεδίο**	**Μεσαίο υποπεδίο**	**Δεξί υποπεδίο**
Π1	**0.1**	3x21	4x6	**6x11**
Π2	**0.05**	5x41	7x11	**11x21**
Π3	**0.025**	9x81	13x21	**21x41**
Π4	**0.0125**	17x161	25x41	**41x81**
Π5	**0.00625**	33x321	49x81	**81x161**
Π6	**0.003125**	65x641	97x161	**161x321**
Π7	**0.0015625**	129x1281	193x321	**321x641**

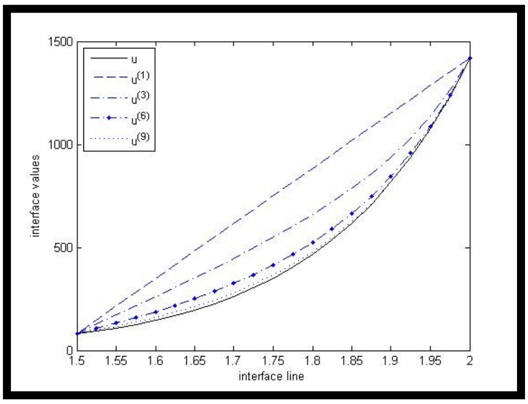
Πίνακας 1: Περιπτώσεις ελέγχου που εξετάστηκαν μαζί με το βήμα διακριτοποίησης και το μέγεθος πλέγματος για το αριστερό, μεσαίο και δεξί υποπεδίο του ομοιόμορφου και του ανομοιόμορφου προβλήματος

Ο αριθμός των σημείων των διεπαφών σε κάθε περίπτωση ισούται με τον αριθμό των σημείων της y διάστασης του μεσαίου υποπεδίου. Αυξάνεται, δηλαδή, από τα 6 έως τα 321 σημεία τόσο για το ομοιόμορφο, όσο και για το ανομοιόμορφο πρόβλημα. Στην ομοιόμορφη περίπτωση το αριστερό υπο-πεδίο είναι το μεγαλύτερο πρόβλημα από τα τρία με σημαντική διαφορά από τα υπόλοιπα. Στην ανομοιόμορφη περίπτωση το δεξί υπο-πεδίο είναι αυτό με το βαρύτερο έργο. Οι διεπαφές έχουν όλες ίσο αριθμό σημείων και άρα απαιτούν ίσο φόρτο εργασίας για την επεξεργασία τους.

Το ιστορικό της σύγκλισης αποτυπώνεται στις επόμενες εικόνες. Πιο συγκεκριμένα, στο αριστερό γράφημα παρουσιάζεται η νόρμα μεγίστου της σχετικής διαφοράς διαδοχικών επαναλήψεων για τη διεπαφή $\mathrm{x}_1 = \frac{1}{3}$ του ομοιόμορφου προβλήματος για $h = 0.1,\ 0.05,\ 0.025$. Όπως άλλωστε υπόσχεται η μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή, παρατηρούμε ότι ο ρυθμός σύγκλισης είναι ανεξάρτητος του τοπικού βήματος διακριτοποίησης h. Για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για τη διεπαφή $\mathrm{x}_1 = \frac{1}{3}$ στο δεξί γράφημα παρουσιάζονται η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις για τις επαναλήψεις 1, 3, 6, 10 για $h = 0.05$.



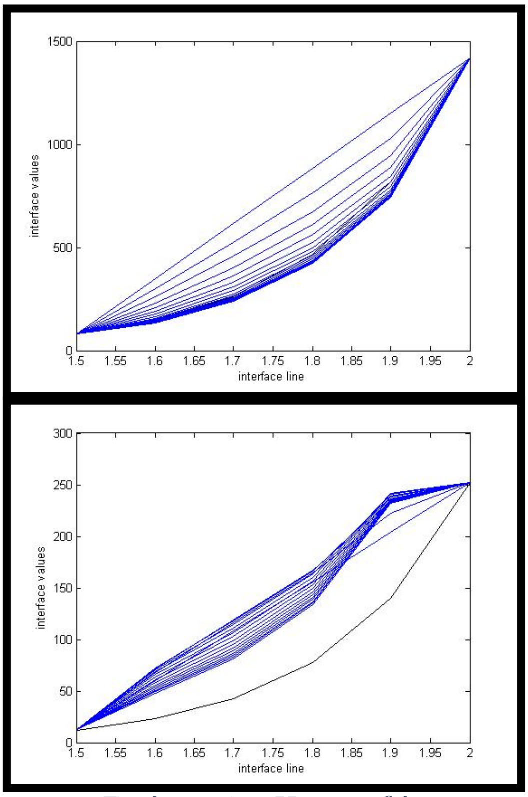
Εικόνα 2: Η νόρμα μεγίστου της σχετικής διαφοράς διαδοχικών επαναλήψεων για τη διεπαφή x_1=1/3 του ομοιόμορφου προβλήματος για h=0.1,0.05,0.025.



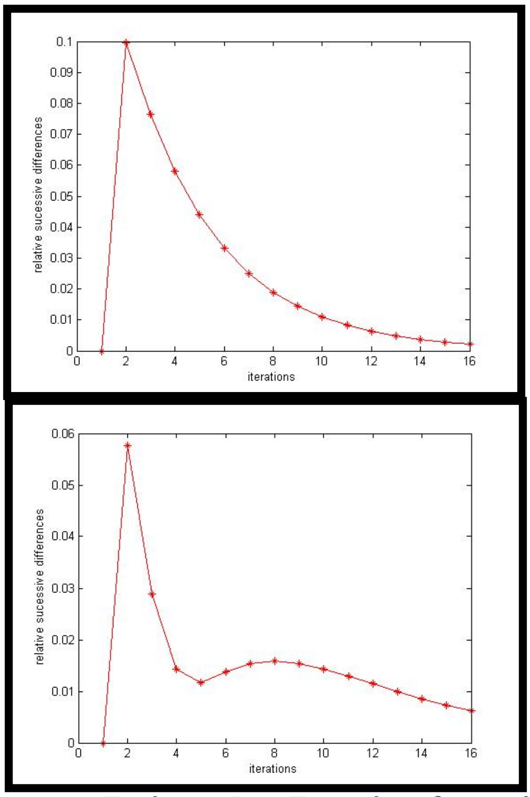
Εικόνα 3: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για τη διεπαφή x_1=1/3 για τις επαναλήψεις 1, 3, 6, 10 για h=0.05.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται αναλυτικά τα αποτελέσματα που προκύπτουν για όλες τις διεπαφές και για τα δύο προβλήματα για κάθε μία από τις περιπτώσεις Π1, Π2, Π3. Οι περιπτώσεις ελέγχου επιλέχτηκαν για να διερευνηθεί η συμπεριφορά της παράλληλης υλοποίησης και όχι για λόγους ακρίβειας, οπότε γι' αυτό το λόγο δεν παρουσιάζουμε εδώ τις γραφικές παραστάσεις των περιπτώσεων Π4, Π5, Π6 και Π7.

Οι γραφικές παραστάσεις για την περίπτωση Π1 και το ομοιόμορφο πρόβλημα είναι οι ακόλουθες:



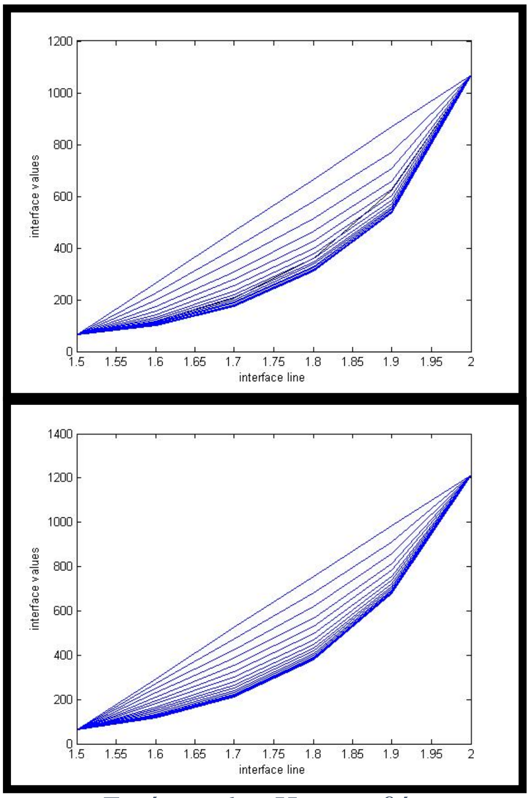
Εικόνα 4: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις – ομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π1, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).



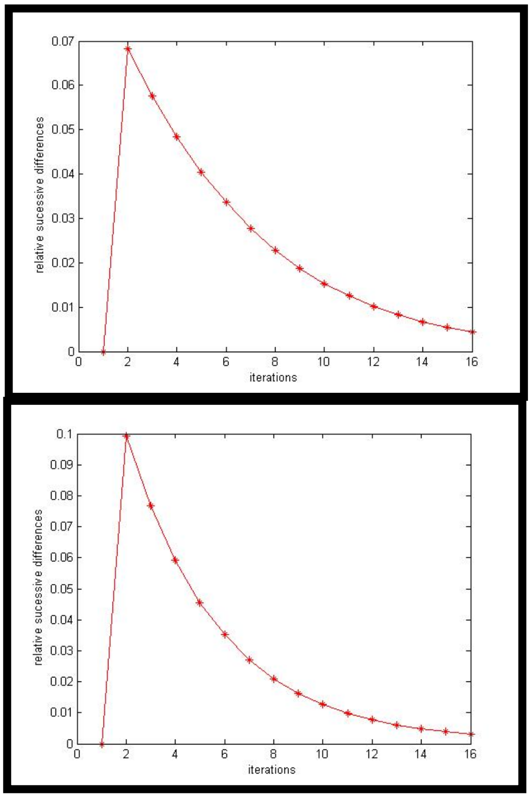
Εικόνα 5: Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων - ομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π1, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω)

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Αντίστοιχα για το ανομοιόμορφο πρόβλημα:

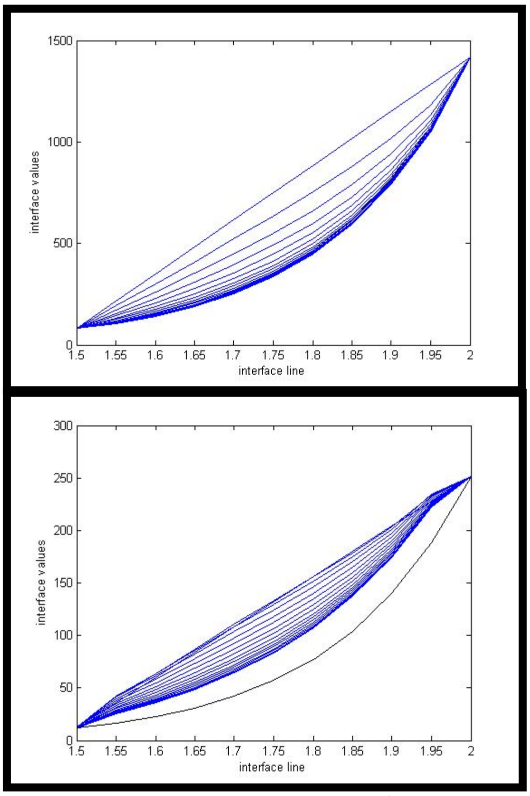


Εικόνα 6: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις – ανομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π1, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

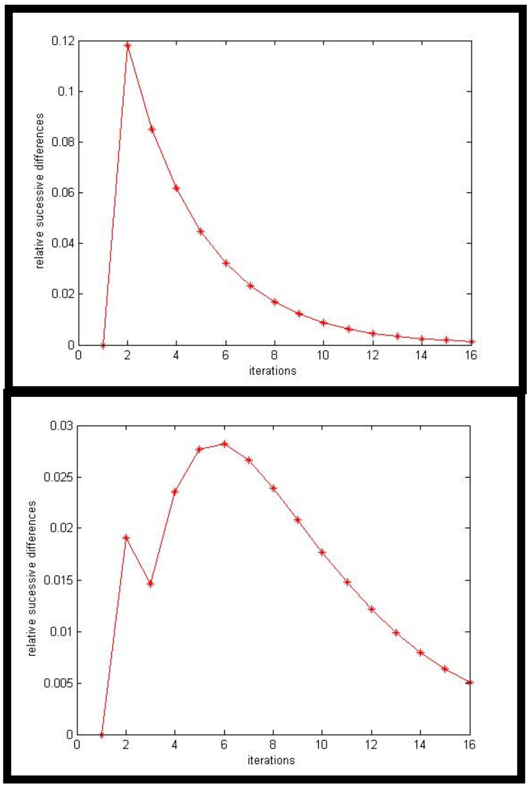


Εικόνα 7: Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων – ανομοιό-μορφο πρόβλημα, περίπτωση Π1, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

Ακολουθούν οι γραφικές παραστάσεις για την περίπτωση Π2. Αρχικά για το ομοιόμορφο πρόβλημα:

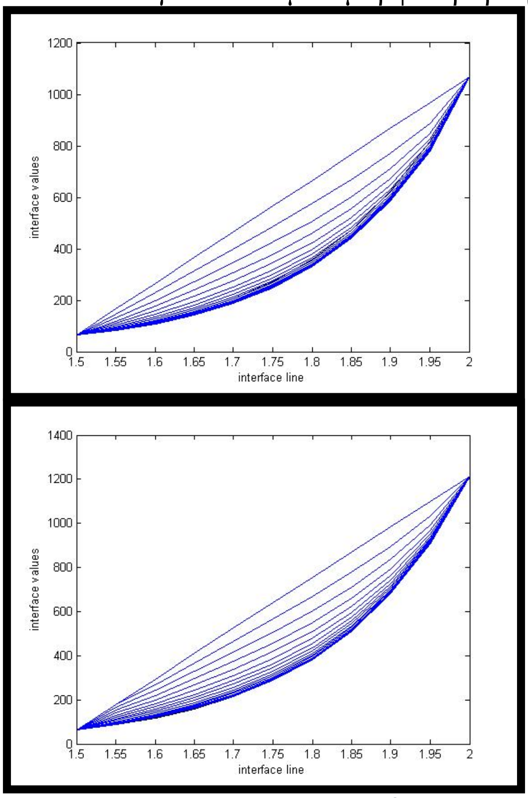


Εικόνα 8: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις – ομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π2, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

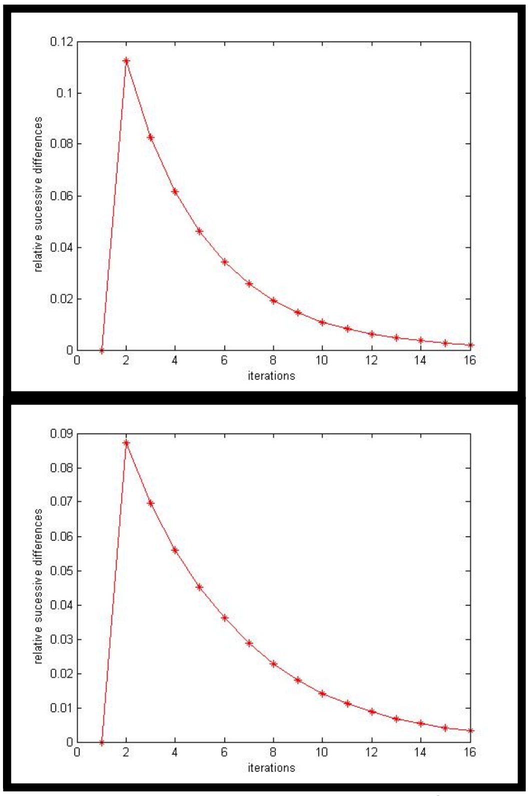


Εικόνα 9: Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων - ομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π2, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

Και για το ανομοιόμορφο πρόβλημα:



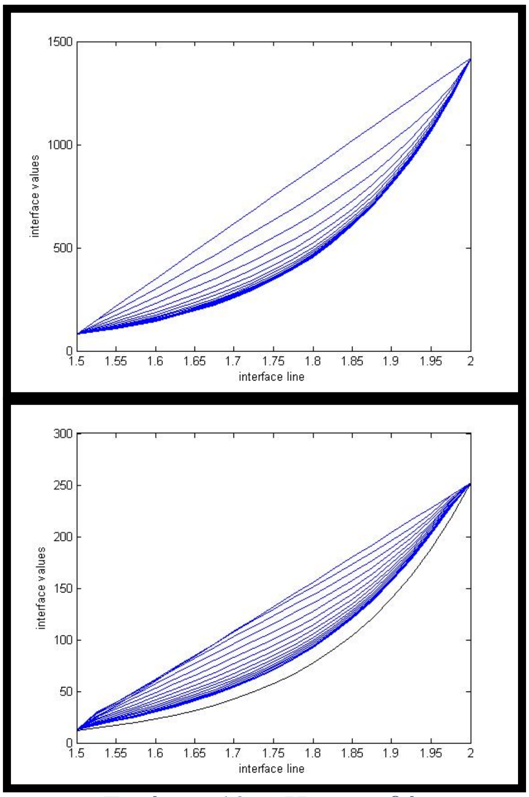
Εικόνα 10: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις – ανομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π2, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).



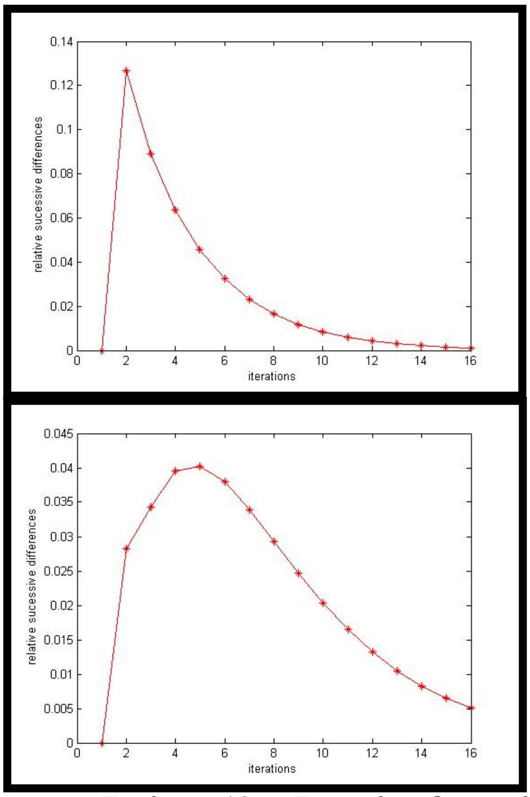
Εικόνα 11: Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων - ανομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π2, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ακολουθούν οι γραφικές παραστάσεις για την περίπτωση Π3. Αρχικά για το ομοιόμορφο πρόβλημα:

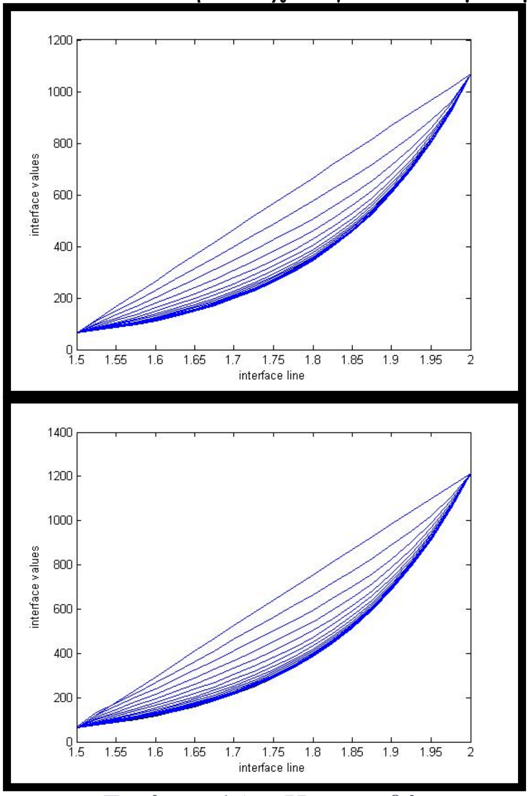


Εικόνα 12: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις – ομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π3, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

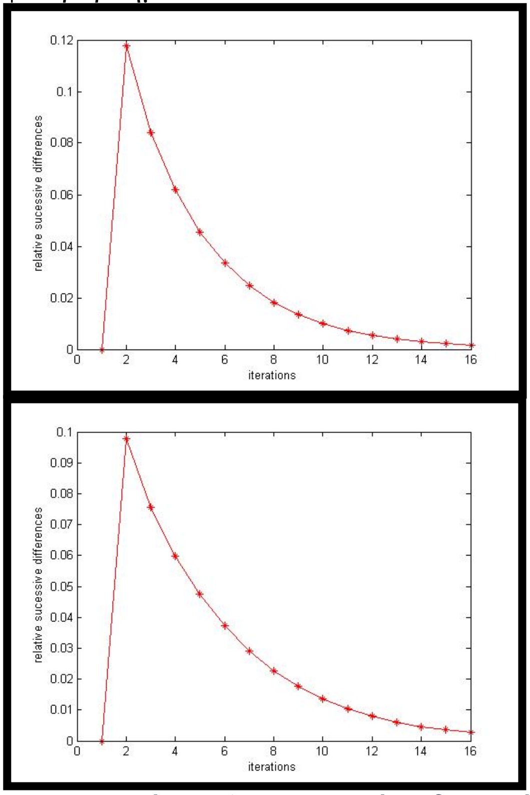


Εικόνα 13: Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων - ομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π3, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

Και στη συνέχεια για το ανομοιόμορφο πρόβλημα:



Εικόνα 14: Η ακριβής και οι υπολογισμένες λύσεις – ανομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π3, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).



Εικόνα 15: Σχετικές διαφορές διαδοχικών επαναλήψεων - ανομοιόμορφο πρόβλημα, περίπτωση Π3, διεπαφή 1 (πάνω) και διεπαφή 2 (κάτω).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Στον πίνακα 3 παρουσιάζονται οι συνολικοί χρόνοι εκτέλεσης της σειριακής και της παράλληλης υλοποίησης.

	Π1	Π2	Π3	Π4	Π5	Π6	Π7
Ομοιόμορφο πρόβλημα							
Σειριακή Υλοποίηση	**1.900**	**2.664**	**5.216**	**12.883**	40.883	178.217	996.348
Παράλληλη Υλοποίηση	3.495	4.068	6.140	13.595	**39.808**	**154.633**	**723.731**
Ανομοιόμορφο πρόβλημα							
Σειριακή Υλοποίηση	**2.294**	**2.854**	**5.111**	13.251	37.266	179.561	1057.644
Παράλληλη Υλοποίηση	3.720	4.264	5.732	**10.633**	**34.172**	**126.607**	**918.838**

Πίνακας 2: Χρόνοι συνολικής εκτέλεσης σειριακής και παράλληλης υλοποίησης

Για το ομοιόμορφο πρόβλημα η παράλληλη υλοποίηση αρχίζει να γίνεται γρηγορότερη από την περίπτωση Π5 και μετά, ενώ για το ανομοιόμορφο από την περίπτωση Π4 και μετά. Αυτό είναι λογικό μιας και στο ομοιόμορφο πρόβλημα ένα από τα 3 υπο-προβλήματα είναι σημαντικά μεγαλύτερο από τα υπόλοιπα και άρα είναι το κυρίαρχο στο χρόνο εκτέλεσης και της σειριακής και της παράλληλης υλοποίησης.

Η σειριακή εκτέλεση πραγματοποιείται σε έναν κόμβο με 4 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2620, 2.00GHz επεξεργαστές και 2GB RAM και η παράλληλη σε 3 κόμβους με την ίδια διαμόρφωση, στην Cloud Υποδομή του Εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων, του τμήματος Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής, του Πανεπιστημίου Πατρών.

Ο χρόνος των σειριακών εκτελέσεων περιλαμβάνει το συνολικό χρόνο των υπολογισμών για τα τρία πεδία και τις δύο διεπαφές για 16 επαναλήψεις. Στις παράλληλες εκτελέσεις, ο συνολικός χρόνος αντιστοιχεί στο χρόνο που απαιτείται για την επίλυση του μεγαλύτερου από τα τρία υπο-πεδία μαζί με τους υπολογισμούς για τις διεπαφές και την απαραίτητη επικοινωνία, για 16 επαναλήψεις. Οι περιπτώσεις ελέγχου επιλέχτηκαν για να διερευνηθεί η συμπεριφορά της παράλληλης υλοποίησης και όχι για λόγους ακρίβειας. Όσο τα πλέγματα γίνονται λεπτότερα, ο φόρτος εργασίας αυξάνεται σημαντικά, ενώ ο χρόνος επικοινωνίας αυξάνεται με μια τάξη μεγέθους μικρότερη. Αυτός είναι ο κύριος λόγος που παρατηρείται κέρδος για λεπτά πλέγματα.

Τα αποτελέσματα της παραπάνω υλοποίησης παρουσιάστηκαν στο διεθνές συνέδριο NUMAN 2014 (Chania, Greece, 9/2014), στην εργασία: A. Korfiati, P. Tsobanopoulou and S. Likothanassis, "*Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO*".

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

4. ΠΑΡΑΔΟΤΕΑ

1. Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση Προόδου φυσικού αντικειμένου.

2. Δύο (2) επιστημονικά άρθρα σε πρακτικά διεθνών συνεδρίων σχετικά με το αντικείμενο του έργου. Παρακάτω δίνονται οι αναφορές των άρθρων (το πλήρες κείμενο επισυνάπτεται):

- *Korfiati, P. Tsompanopoulou, S. Likothnassis*, **“Serial and Parallel Implementation of the Interface Relaxation Method GEO”**, Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

- ***P. Alefragis, A. Spyrou and S. Likothanassis, “Application of a hybrid parallel Monte Carlo PDE Solver on rectangular multi-domains”*** Numerical Analysis Conference (NumAn 2014), September 2-5, Chania, Greece, 2014.

5. ΣΥΝΕΡΓΑΣΙΕΣ

Κατά τη διάρκεια του έργου η ΚΕΟ 3, ανέπτυξε τις παρακάτω συνεργασίες:

- Με την ΚΕΟ 2
  - σε θέματα υλοποίησης της μεθόδου Interface Relaxation στην πλατφόρμα FEniCS (με την Αν. Καθηγήτρια Γ. Τσομπανοπούλου) και
  - της μεθόδου Monte Carlo σε pThreads (με τον Καθηγητή Μ. Βάβαλη και τον υποψήφιο διδάκτορα Μ. Μαρούδα).

6. ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΕΙΣ

Στην τελευταία φάση του έργου θα γίνει αξιοποίηση της υποδομής Cloud, σαν περιβάλλον λειτουργίας της πλατφόρμας FEniCS, όπως έχει εμπλουτιστεί με την παράλληλη υλοποίηση των μεθόδων IR και Monte Carlo. Έχει γίνει ο σχεδιασμός της Πλατφόρμα IRaaS (Interface Relaxation as a Service), που θα αποτελεί ένα ολοκληρωμένο Περιβάλλον επίλυσης Προβλημάτων.

Η προτεινόμενη Cloud εφαρμογή είναι ένα περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών πεδίων / πολλαπλών φυσικών που υλοποιεί τη μεθοδολογία χαλάρωσης στη διεπαφή. Ο χρήστης δίνει ένα πρόβλημα σαν είσοδο, επιλέγει την IR μέθοδο που ταιριάζει καλύτερα με το συγκεκριμένο πρόβλημα και έχει πρόσβαση στη λύση σε ένα κοντά στο βέλτιστο χρόνο εκτέλεσης, από οποιοδήποτε μέρος και οποιαδήποτε συσκευή. Συγχρόνως, η εφαρμογή δεσμεύει τους ελάχιστους δυνατούς πόρους αυτόματα, στο παρασκήνιο, χωρίς παρέμβαση του χρήστη.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Για την επίτευξη των παραπάνω στόχων, εγκαταστάθηκε στις υποδομές του εργαστηρίου Αναγνώρισης Προτύπων μια συγκεκριμένη πλατφόρμα λογισμικού για την παροχή υπηρεσιών Cloud, το CloudStack. To CloudStack αποτελεί ένα εργαλείο που ελέγχει τη δεξαμενή των υπολογιστικών πόρων καθώς επίσης διαχειρίζεται το δίκτυο και τον αποθηκευτικό χώρο. Η αρχιτεκτονική του συστήματος είναι βασισμένη στο μοντέλο IaaS και SaaS της τεχνολογίας Cloud και ταυτόχρονα στη διαχείριση της κατανομής των υπολογιστικών πόρων του Cloud έτσι ώστε να δημιουργηθούν ομάδες εικονικών μηχανών για παράλληλη και κατανεμημένη επεξεργασία. Υποστηρίζει ένα περιβάλλον για την επίλυση διαφόρων ειδών προβλημάτων και ανάλυσης δεδομένων παρέχοντας μία απλή και φιλική προς τον χρήστη διεπαφή, αυτόματη διανομή του προβλήματος στους κατάλληλους υπολογιστικούς πόρους, τον απαραίτητο αποθηκευτικό χώρο για τα δεδομένα εισόδου και των αποτελεσμάτων ενός προβλήματος καθώς και την απαιτούμενη επικοινωνία μεταξύ των συστατικών στοιχείων του συστήματος.

7. ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[1] Tony F. Chan and Tarek P. Mathew. Domain decomposition algorithms. In Acta Numerica 1994, pages 61-43. Cambridge University Press, 1994.
[2] T. F. Chan and D. C. Reasco. A survey of preconditioners for domain decomposition. Technical Report /DCS/RR-414, Yale University, 1985.
[3] 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.
[4] 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).
[5] Logg, A., Mardal, K. A., Wells, G. N. et al.: Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. Springer, (2012).
[6] Rabbitmq, 2014. Online. Available: www.rabbitmq.com/documentation.html(accessed July 11, 2014).
[7] Logg, A.,Wells G. N.: DOLFIN: Automated Finite Element Computing. ACM Transactions on Mathematical Software 37, 2 (2010).

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

Ενδεικτικό τμήμα κώδικα, για την σειριακή υλοποίηση της GEO IR.

Αρχικά γίνεται η δημιουργία των υπο-πεδίων. Ενδεικτικά παρουσιάζουμε τη δημιουργία του αριστερού υπο-πεδίου για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για την περίπτωση, όπου $h = 0.5$.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
meshdown = RectangleMesh(0, 0, 0.3333, 2, 7, 40, 'left')

Vdown = FunctionSpace(meshdown, 'Lagrange', 1)
```

Στη συνέχεια ορίζουμε τις οριακές συνθήκες και τις συνθήκες των διεπαφών. Ενδεικτικά, η πρώτη (αριστερή) διεπαφή:

```
    int1_expr = Expression('4135.5*x[1]-6077.6')
    class Interface1(SubDomain):
        def inside(self, x, on_boundary):
            return on_boundary and abs(x[0] - 0.3333) <
tol and abs(x[1] - 2) > tol and abs(x[1] - 1.5) > tol
    Gamma_4_left = DirichletBC(Vdown, int1_expr,
Interface1())
```

Ακολουθεί ο ορισμός του παραμετρικού προβλήματος. Πάλι για το αριστερό υπο-πεδίο του ομοιόμορφου προβλήματος:

```
    u = TrialFunction(Vdown)
    v = TestFunction(Vdown)
    f = interpolate(f_expr, Vdown)
    a = (inner(nabla_grad(u), nabla_grad(v))+g2*inner(u,
v))*dx
    L = f*v*dx
```

Και στη συνέχεια ο υπολογισμός της λύσης:

```
u = Function(Vdown)
solve(a == L, u, bcsdown)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Και της παραγώγου:

```
V_g = VectorFunctionSpace(meshdown, 'Lagrange', 1)
v = TestFunction(V_g)
w = TrialFunction(V_g)
a = inner(w, v)*dx
L = inner(grad(u), v)*dx
grad_u = Function(V_g)
solve(a == L, grad_u)
```

Παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο λαμβάνουμε τις τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών:

```
        vertex_to_dof_map =
Vdown.dofmap().vertex_to_dof_map(meshdown)
        dof_to_vertex_map =
Vdown.dofmap().dof_to_vertex_map(meshdown)
        m = u.vector()
        dofs_at_vertices = m[dof_to_vertex_map]
        coor = meshdown.coordinates()

        grad_u_x, grad_u_y = grad_u.split(deepcopy=True)

        for vdown in vertices(meshdown):
                ldown = coor[vdown.index()
                ldown[0], ldown[1],
dofs_at_vertices[vdown.index()],
        dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()],

dofs_at_vertices_g_y_down[vdown.index()]
```

Και ακολουθεί ο τρόπος που τις επαναθέτουμε, αφού τις επεξεργαστούμε:

```
        downbound=(dofs_at_vertices[vdown.index()]+dofs_at_vertices_up[vup.index()])/2+omega*(-dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()]+dofs_at_vertices_g_x_up[vup.index()])

        upbound=(dofs_at_vertices[vdown.index()]+dofs_at_vertices_up[vup.index()])/2+omega*(-dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()]+dofs_at_vertices_g_x_up[vup.index()])

        u.vector().set_local(dofs_at_vertices.array()[vertex_to_dof_map])
        downbound=Function(Vdown)
        downbound.assign(u)
```

Γράφουμε τα αποτελέσματα σε αρχεία ως εξής:

```
        import numpy as np

        mattxt3=file('dom1.txt', 'w')
        mattxt3.write('%%iteration x y ul ulx uly \n')
        for vdown in vertices(meshdown):
                ldown = coor[vdown.index()]
                mattxt3=file('dom1.txt', 'a')
                np.savetxt(mattxt3, np.c_[iter, ldown[0], ldown[1], dofs_at_vertices[vdown.index()], dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()], dofs_at_vertices_g_y_down[vdown.index()]], delimiter=' ', fmt='%d %f %f %f %f %f', newline=os.linesep)
```

Και σχεδιάζουμε γραφικές παραστάσεις:

```
        import matplotlib.pyplot as plt
        plt.plot(uupsto175)
        plt.ylabel('u [0.3333,1.75]')
        plt.xlabel('iterations')
        plt.show()
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ

Ενδεικτικό τμήμα κώδικα, για την παράλληλη υλοποίηση της GEO IR.

Ο client αρχικοποιεί την επικοινωνία:

```
	def __init__(self):
		self.credentials = pika.PlainCredentials('test', 'test')
		self.connection = 
pika.BlockingConnection(pika.ConnectionParameters('150.140.1
39.89',5672,'/',self.credentials))
		self.channel = self.connection.channel()
		result=self.channel.queue_declare(exclusive=True)
		self.callback_queue = result.method.queue
		self.channel.basic_consume(self.on_response, 
no_ack=True,
					queue=self.callback_queue)
		self.connection2= 
pika.BlockingConnection(pika.ConnectionParameters('150.140.1
39.89',5672,'/',self.credentials))
		self.channel2 = self.connection2.channel()

result2=self.channel2.queue_declare(exclusive=True)
		self.callback_queue2 = result2.method.queue
		self.channel2.basic_consume(self.on_response, 
no_ack=True,
					queue=self.callback_queue2)
```

Περιμένει τις απαντήσεις από τους servers:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

```
        def on_response(self, ch, method, props, body):
                #print "on_response result ch=%s guess=%s" %
(ch,self.channel)
                if ch == self.channel:
                    self.response = body
                else:
                    self.response2 = body
```

Αφού πρώτα τους στείλει τις τιμές στις διεπαφές που υπολόγισε επιλύοντας το πρόβλημα στην εκάστοτε επανάληψη:

```
        self.response = None
                self.corr_id = str(uuid.uuid4())
                self.channel.basic_publish(exchange='',
                                                routing_key='hello',

properties=pika.BasicProperties(
                                                      reply_to =
self.callback_queue,
                                                      correlation_id =
self.corr_id,
                                                      ),
                                                body=inter2)
```

Αντίστοιχα ο κάθε server επιλύει το πρόβλημά του, λαμβάνει από τον client τη λύση και την παράγωγο που υπολόγισε στη διεπαφή και υπολογίζει τις καινούργιες τιμές στη διεπαφή:

```
        response=(interfaceup+interfaced)/2+omega*(-
gradientd+gradientup)
```

Το αποτέλεσμα αυτό το χρησιμοποιεί για την επόμενη επανάληψή του. Το στέλνει, όμως και στον client για να προχωρήσει και αυτός με την επόμενη επανάληψη του.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

```
        ch.basic_publish(exchange='',
                         routing_key=props.reply_to,
properties=pika.BasicProperties(correlation_id = \
                                                 props.correlation_id),
                         body=json.dumps(response.tolist()))
           ch.basic_ack(delivery_tag = method.delivery_tag)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα ΣΤ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 3.2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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)

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Πίνακας Περιεχομένων

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

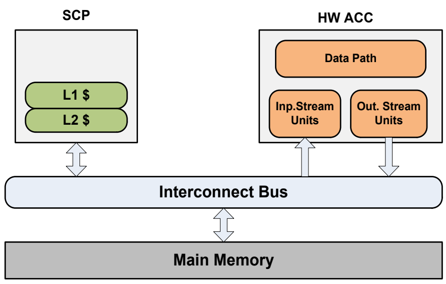
1. Σκοπός

Η έκθεση για το 2014 παρουσιάζει την πρόοδο της Δράσης 3.2 στις πλατφόρμες CPU και FPGA δίδοντας έμφαση στην ανάπτυξη εργαλείων που θα χρησιμοποιηθούν για υλοποίηση των elliptic PDE solvers σε FPGAs.

Θα παρουσιάσουμε τις βασικές αρχές, τον σχεδιασμό της αρχιτεκτονικής και την υλοποίηση του εργαλείου λογισμικού SOpenCL, που έχει αναπτυχθεί για τον σχεδιασμό επιταχυντών υλικού (hardware accelerators) από κώδικα OpenCL. Η βασική ιδέα του SOpenCL είναι να δώσει την δυνατότητα σε μηχανικούς λογισμικού χωρίς γνώσεις αρχιτεκτονικής και σχεδιασμό υλικού να δημιουργήσουν τέτοιους επιταχυντές για OpenCL εφαρμογές. Οι επιταχυντές αυτοί μπορούν να ενσωματωθούν σε ένα σύστημα που περιέχει ένα Host unit, συνήθως μία CPU γενικού σκοπού, και να λειτουργήσουν όπως και μία GPU επιταχύνοντας δηλ. τμήματα του κώδικα που έχουν υψηλές απαιτήσεις απόδοσης. Η SOpenCL έχει χρησιμοποιηθεί σε μία ευρεία γκάμα εφαρμογών και μερικές από αυτές θα περιγραφούν σε αυτήν την έκθεση.

2. Χρήση μοντέλου παράλληλου προγραμματισμού OpenCL για σύνθεση αρχιτεκτονικών (Silicon OpenCL)

Σε αυτήν την έκθεση θα περιγράψουμε το SOpenCL, ένα νέο εργαλείο και μεθοδολογία η οποία δημιουργεί επιταχυντές υλικού (hardware accelerators) που είναι τμήματα ενός ολόκληρου συστήματος (System On Chip, SoC), όπως φαίνεται και στην Εικόνα 1.



Εικόνα 1. Το τελικό μας σύστημα που περιλαμβάνει τον επιταχυντή υλικού (HW ACC) που παράγει η OpenCL και τον κύριο επεξεργαστή (Scalar Processor, SCP).

Η OpenCL είναι ένα βιομηχανικό standard για την δημιουργία παράλληλων προγραμμάτων με σκοπό την εκτέλεση σε ετερογενή συστήματα (heterogeneous systems) [1]. Απαλλάσσει τον προγραμματιστή από το να γράψει κώδικα για κάθε πιθανή ετερογενή πλατφόρμα και με το να ασχοληθεί με τεχνικές λεπτομέρειες

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Ευρωπαϊκή Ένωση Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΣΠΑ 2007-2013 πρόγραμμα για την ανάπτυξη ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

χαμηλού επιπέδου (low level details) δίδοντάς του την ευκαιρία να εστιάσει στον ίδιο τον αλγόριθμο και στο πρόβλημα που καλείται να επιλύσει. Έχουμε αναφερθεί λεπτομερώς στην OpenCL στην έκθεση του MATENVMED για το 2012.

Υπάρχουν κάποιες σημαντικές τεχνικές δυσκολίες στον σχεδιασμό και την υλοποίηση του SOpenCL [5]. Η OpenCL χρησιμοποιεί παράλληλους πυρήνες (kernels) για να εκφράσει υπολογισμούς σε πολύ χαμηλό επίπεδο (granularity), που είναι το επίπεδο του work-item (ή thread όπως έχουμε δει στην CUDA). Αυτό είναι ιδιαίτερα χρήσιμο γιατί φανερώνει τον παραλληλισμό της εφαρμογής στο χαμηλότερο επίπεδο και διευκολύνει την εκτέλεση του προγράμματος από CPU και GPU. Παρόλα αυτά, η δημιουργία επιταχυντών υλικού στο επίπεδο του work-item μπορεί να μην είναι ιδανική λύση λόγω του ότι κάθε τέτοιος επιταχυντής θα κάνει πολύ λίγη δουλειά κάθε φορά που καλείται.

Σαν πρώτη φάση, το εργαλείο SOpenCL περιέχει έναν μεταγλωττιστή source-to-source που μεταφράζει τον κώδικα OpenCL σε κώδικα C σε διαφορετικό όμως επίπεδο παραλληλισμού από τον κώδικα OpenCL. Στην συγκεκριμένη περίπτωση ο μεταγλωττιστής μετατρέπει τον κώδικα σε επίπεδο work-group (ή block), έτσι ώστε κάθε κλήση του επιταχυντή να εκτελεί εργασία που να αντιστοιχεί σε ένα work-group.

Η δεύτερη φάση του SOpenCL μετατρέπει τον C κώδικα σε έναν επιταχυντή υλικού σε synthesizable Verilog. Ο επιταχυντής ακολουθεί ένα συγκεκριμένο πρότυπο αρχιτεκτονικής (architectural template) το οποίο παίρνει συγκεκριμένη μορφή ανάλογα με τις απαιτήσεις απόδοσης του χρήστη και την συγκεκριμένη εφαρμογή που υλοποιείται στην FPGA. Η δεύτερη φάση του SOpenCL αποτελείται από μία σειρά από βελτιστοποιήσεις του compiler όπως predication, code slicing και modulo scheduling που εφαρμόζονται διαδοχικά στον κώδικα C. Στο τελικό στάδιο το εργαλείο SOpenCL δημιουργεί synthesizable Verilog.

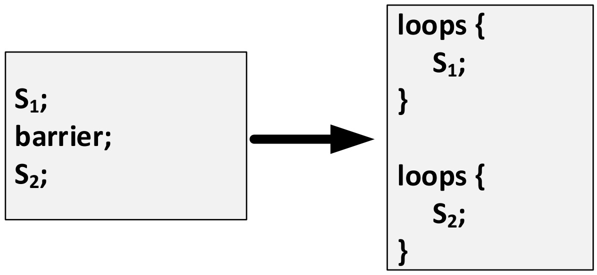
2.1. Πρώτη φάση του SOpenCL

Για να επιτύχουμε την αποδοτική εκτέλεση παράλληλων πυρήνων OpenCL, εφαρμόζουμε μια αλληλουχία από μετατροπές source to source για να ανεβάσουμε το επίπεδο του πυρήνα από το work-item στο work-group. Μετά τις μετατροπές αυτές στον πηγαίο κώδικα, ο νέος παράλληλος πυρήνας εκφράζει τον υπολογισμό που εκτελεί το work-group.

Η πρώτη φάση του SOpenCL αποτελείται από δύο βήματα:

1. Σειριοποίηση των λογικών νημάτων (Logical Thread Serialization). Αυτό το βήμα περικλείει τον κώδικα του πυρήνα με ένα τριπλό loop και με αυτόν τον τρόπο μετατρέπει τον υπολογισμό ενός work-item σε υπολογισμό ενός work-group.
2. Απαλοιφή εντολών συγχρονισμού (barriers). Η OpenCL δίνει την δυνατότητα στον προγραμματιστή να συγχρονίσει την εκτέλεση των work-items που εκτελούν έναν κώδικα OpenCL μέσω των εντολών barrier. Μία εντολή barrier αναγκάζει όλα τα work-items ενός work-group να εκτελέσουν την εντολή αυτή πριν μπορέσει οποιοδήποτε work-item να συνεχίσει με την εκτέλεση των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 2. Απαλοιφή εντολών barriers με την χρήση loop fission.

εντολών μετά την barrier. Αντίστοιχα, η εντολή barrier μέσα σε ένα loop αναγκάζει όλα τα work-items να περιμένουν στην εντολή αυτή πριν μπορέσουν να συνεχίσουν με την επόμενη επανάληψη του loop.

Για να εξασφαλίσουμε σωστή λειτουργικότητα κατά την μετατροπή του κώδικα από OpenCL σε C σε περίπτωση που υπάρχουν εντολές barrier, χωρίζουμε τον κώδικα σε δύο μπλόκς, ένα πριν την barrier και ένα μετά έτσι ώστε αυτά τα μπλόκς να μην περιέχουν την εντολή barrier. Μετά εφαρμόζουμε την τεχνική loop fission για να χωρίσουμε το αρχικό τριπλό loop σε δύο επιμέρους τριπλά loops για να εξασφαλίσουμε την σωστή μετατροπή του κώδικα σε C (Εικόνα 2).

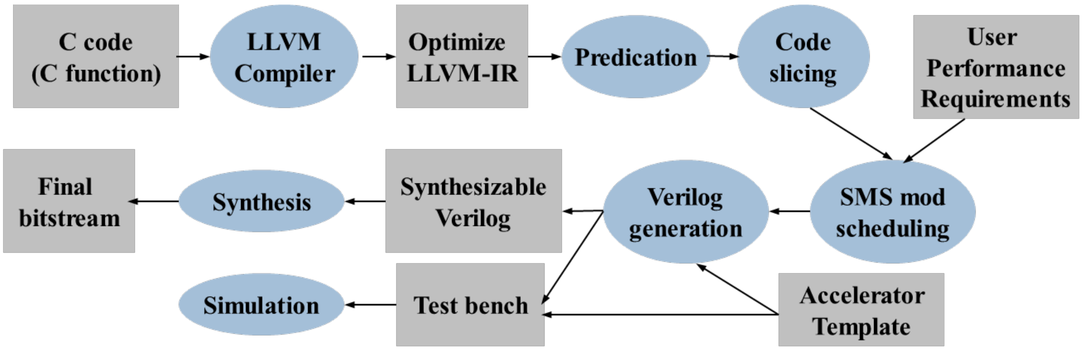
Περισσότερες λεπτομέρειες για τον μετατροπές που εφαρμόζει ο compiler υπάρχουν στο [5].

2.2. Δεύτερη φάση του SOpenCL

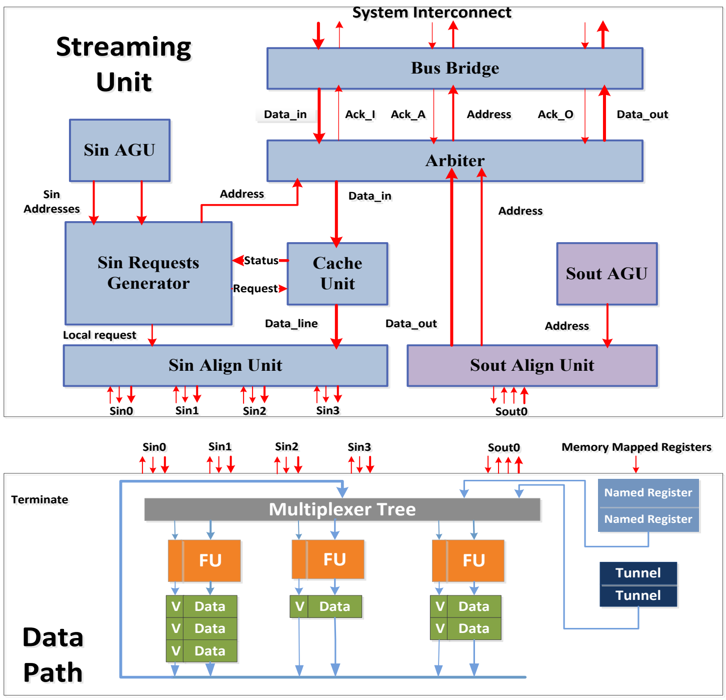
Μετά την πρώτη φάση, το SOpenCL μεταφράζει τον κώδικα σε Verilog όπως φαίνεται και στην Εικόνα 3. Ο αλγόριθμος αυτός χρησιμοποιεί και επεκτείνει τον LLVM compiler [3]. Ένα σημαντικό χαρακτηριστικό του SOpenCL είναι ότι χρησιμοποιεί ένα καλά σχεδιασμένο αρχιτεκτονικό πρότυπο (template) για να δημιουργήσει υλικό όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.

Πρότυπο αρχιτεκτονικής

Η μονάδα δεδομένων της Εικόνα 4 αποτελείται από ένα δίκτυο από λειτουργικές μονάδες (Functional Units, FUs) που αναλαμβάνουν το κυρίως έργο της επεξεργασίας δεδομένων. Οι μονάδες αυτές λαμβάνουν δεδομένα από τις μονάδες Εισόδου/Εξόδου Ροής σε μορφή FIFO και παράγουν τα δεδομένα εξόδου πάλι σε μορφή FIFO. Η διασύνδεση μεταξύ των λειτουργικών μονάδων γίνεται μέσω κυκλωμάτων ουρών FIFO που αποτελούνται από πολυπλέκτες και buffers για να κατευθύνουν δεδομένα από τις μονάδες που παράγουν στις μονάδες που καταναλώνουν ενδιάμεσα αποτελέσματα.



Εικόνα 3. Ο αλγόριθμος δημιουργίας επιταχυντή υλικού από κώδικα C.



Εικόνα 4. Το πρότυπο αρχιτεκτονικής που χρησιμοποιούμε περιλαμβάνει την μονάδα Δεδομένων (Data Path) και την μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής (Streaming Unit)

Το SOpenCL διαμορφώνει τον τελικό επιταχυντή υλικού μεταβάλλοντας τον τύπο του μίγματος των FUs (δηλ. πόσους multipliers, adders, shifters, κοκ), την συγκεκριμένη λειτουργία που επιτελούν, την διασύνδεση μεταξύ των FUs καθώς και το bandwidth μεταξύ της μονάδας δεδομένων και της μονάδας Εισόδου/Εξόδου.

Η μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής αναλαμβάνει όλες τις αρμοδιότητες που έχουν να

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

κάνουν με την μεταφορά δεδομένων μεταξύ της κύριας μνήμης και του επιταχυντή. Αυτές οι αρμοδιότητες είναι η δημιουργία των διευθύνσεων μνήμης, ευθυγράμμιση και ταξινόμηση δεδομένων από και προς τον επιταχυντή καθώς και προσαρμογή μεταξύ του επιταχυντή και του διαύλου του συστήματος (system bus). Η μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής αποτελείται από μία ή περισσότερες μονάδες Εισόδου και Εξόδου. Όπως και για την μονάδα Δεδομένων, έτσι και εδώ το SOpenCL συνθέτει το κύκλωμα έτσι ώστε να ταιριάζει στα χαρακτηριστικά της εφαρμογής και στις απαιτήσεις του υπόλοιπου συστήματος.

Ροή του αλγορίθμου SOpenCL

Αναφερόμενος στην Εικόνα 3, βλέπουμε ότι το εργαλείο SOpenCL ακολουθεί μια σειρά από βήματα στον μεταγλωττιστή LLVM για να παράγει το τελικό κύκλωμα του επιταχυντή σε Verilog. Εν συντομία, τα πιο σημαντικά βήματα είναι τα εξής:

a) Compiler optimizations and Predication. Το πρώτο βήμα είναι να μετατρέψουμε τον κώδικα C σε εσωτερική μορφή του LLVM. Ο ίδιος ο LLVM εφαρμόζει μια σειρά από στάνταρντ βελτιστοποιήσεις του κώδικα όπως constant propagation, dead code elimination, strength reduction, κοκ. Το predication είναι μία τεχνική του μεταγλωττιστή η οποία μετατρέπει εξαρτήσεις ελέγχου (control dependencies) σε εξαρτήσεις δεδομένων (data dependencies). Το predication εξαλείφει όλες τις εντολές διακλάδωσης (branches) στον κώδικα C με την χρήση επιπλέον μεταβλητών του 1-bit οι οποίες ονομάζονται Boolean guards. Ο βασικός σκοπός του predication είναι η εξάλειψη όλων των διακλαδώσεων που προέρχονται από εντολές if-then-else, και η προετοιμασία του κώδικα για την επόμενη φάση του modulo scheduling.

b) Code slicing. Ο κώδικας C μετά το πρώτο βήμα εμπεριέχει εντολές Εισόδου/Εξόδου δηλ. εντολές φορτώματος και αποθήκευσης στην μνήμη καθώς και εντολές υπολογισμού. Το βήμα του code slicing διαχωρίζει τον κώδικα σε 3 κομμάτια: (i) το κομμάτι κώδικα που κάνει μόνο υπολογισμούς, (ii) το κομμάτι κώδικα που περιέχει όλες τις εντολές φορτώματος (load) από την μνήμη και τις εντολές υπολογισμού της διεύθυνσης φορτώματος, και (iii) το κομμάτι κώδικα που περιέχει όλες τις εντολές αποθήκευσης (store) από την μνήμη και τις εντολές υπολογισμού της διεύθυνσης αποθήκευσης.

Ο λόγος που εκτελούμε αυτό το βήμα είναι επειδή κάθε ένα από τα 3 κομμάτια του κώδικα αντιστοιχεί και σε διαφορετικό κομμάτι της αρχιτεκτονικής: το υπολογιστικό κομμάτι αντιστοιχεί στην μονάδα επεξεργασίας δεδομένων, ενώ τα κομμάτια για load και store αντιστοιχούν στην μονάδα Εισόδου/Εξόδου Ροής. Με το να ξεχωρίσουμε τον κώδικα σε 3 διακριτά μέρη, μπορούμε να διαμορφώσουμε κάθε ένα τμήμα του επιταχυντή ανεξάρτητα χρησιμοποιώντας πληροφορία από το αντίστοιχο τμήμα του κώδικα.

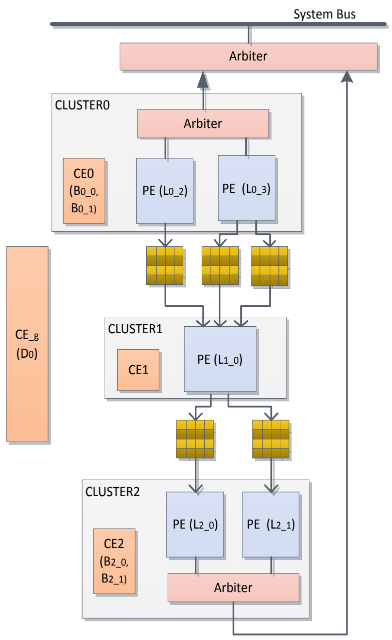
c) Swing Modulo Scheduling (SMS). Η τεχνική SMS είναι μια τεχνική χρονοπρογραμματισμού εντολών (instruction scheduling) η οποία

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

εκμεταλλεύεται τον παραλληλισμό μεταξύ εντολών που ανήκουν σε διαφορετικές επαναλήψεις ενός loop και τις προγραμματίζει να εκτελεσθούν παράλληλα [SMS]. Ο αλγόριθμος SMS χρησιμοποιεί ευριστικές μεθόδους για να ελαχιστοποιήσει το Iteration Interval (II), που είναι το σταθερό διάστημα αριθμού κύκλων μηχανής στο οποίο ξεκινάμε διαδοχικές επαναλήψεις του loop. Το SMS εφαρμόζεται σε κάθε loop και χωριστά σε κάθε ένα από τα τρία τμήματα του κώδικα όπως αυτά έχουν παραχθεί από το code slicing.

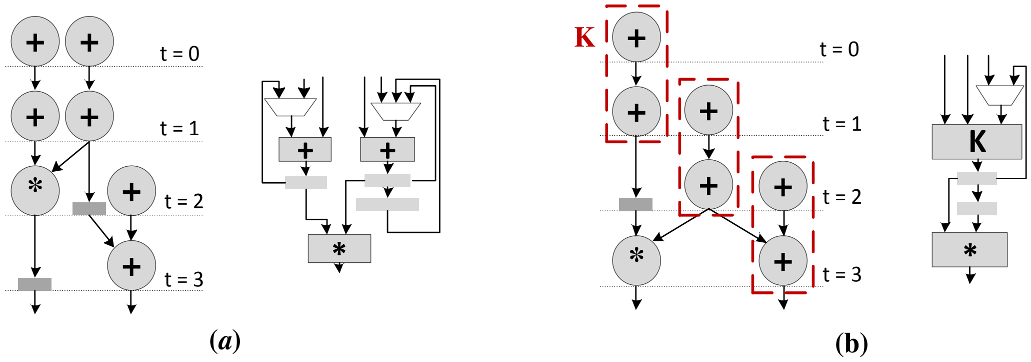
d) Δημιουργία υλικού. Το τελικό βήμα της δεύτερης φάσης του SOpenCL είναι η δημιουργία του επιταχυντή υλικού σε Verilog χρησιμοποιώντας την έξοδο που δημιουργεί το SMS και το αρχιτεκτονικό πρότυπο που περιεγράφηκε προηγουμένως. Εκτός από το υλικό του επιταχυντή, το SOpenCL δημιουργεί ακόμα και ένα αρχείο ελέγχου (testbench) το οποίο χρησιμοποιείται για την αυτοματοποίηση της διαδικασίας ελέγχου του παραχθέντος κυκλώματος.

Η Εικόνα 5 δείχνει το διάγραμμα του επιταχυντή που υλοποιεί τον αλγόριθμο για LU Decomposition. Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος αποτελείται από πολλαπλά loops τα οποία δημιουργούν και παραπάνω του ενός επιταχυντές.



Εικόνα 5. Το αρχιτεκτονικό διάγραμμα ενός επιταχυντή που υλοποιεί τμήμα ενός αλγορίθμου LU Decomposition.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 6. Χρονοδρομολόγηση εντολών σε ένα Data Flow Graph (DFG) με a) βασικές και απλές εντολές και b) με μακροεντολές. Η μακροεντολή K υλοποιείται με το MFU K που είναι ένας 3-bit προσθετής με αρχιτεκτονική διοχέτευσης (pipelined).

2.3. Instruction clustering

Μία επιπλέον βελτιστοποίηση του SOpenCL είναι η ομαδοποίηση (clustering) εντολών για την δημιουργία Macro Functional Units (MFUs), δηλ. λειτουργικών μονάδες που συνδυάζουν παραπάνω από μια απλούστερες λειτουργικότητες [6]. Ο λόγος που δημιουργούμε τέτοια MFUs είναι για να μειώσουμε τον αριθμό των διασυνδέσεων μεταξύ μικρών λειτουργικών μονάδων. Με άλλα λόγια, θέλουμε να μειώσουμε την επιβάρυνση των διασυνδέσεων σε σχέση με τις λειτουργικές μονάδες. Είναι γνωστό μάλιστα ότι τις περισσότερες φορές, ή έλλειψη επαρκούς αριθμού καναλιών διασύνδεσης είναι και ο κυριότερος λόγος για το ότι ένα κύκλωμα δεν μπορεί να υλοποιηθεί σε μια FPGA.

Χρησιμοποιούμε μία μέθοδο που βασίζεται σε grammar-induction τεχνικές για να ομαδοποιήσουμε βασικές εντολές σε μακρο-εντολές (macroinstructions) οι οποίες με την σειρά τους υλοποιούνται σαν MFUs με μικρότερες απαιτήσεις σε πολυπλοκότητα διασυνδέσεων.

Η Εικόνα 6 δείχνει ένα παράδειγμα για το πώς δύο διαδοχικές προσθέσεις (μέσα στα κόκκινα κουτιά) μπορούν να συγχωνευθούν για εκτέλεση σε ένα MFU αντί να εκτελεσθούν σε ένα FU που κάνει πρόσθεση. Η βασική ιδέα είναι ότι μία μεγαλύτερη λειτουργική μονάδα μειώνει την ανάγκη για πολλές διασυνδέσεις μεταξύ μικρότερων μονάδων και συνεπώς αυξάνει την πιθανότητα να έχουμε ένα κύκλωμα το οποίο να μπορεί να πραγματοποιηθεί σε μία FPGA.

2.4. Αποτελέσματα του SOpenCL στα μετροπρογράμματα OpenDwarfs

Το εργαλείο SOpenCL χρησιμοποιήθηκε για την υλοποίηση επιταχυντών υλικού για εφαρμογές που ανήκουν στα Dwarfs. Τα 13 Dwarfs είναι σύνολα εφαρμογών που κάθε ένα από αυτά τα σύνολα μπορούν να χαρακτηρισθούν από ένα κοινό πρότυπο (pattern) υπολογισμών και επικοινωνίας. Για παράδειγμα, ένα από τα 13 Dwarfs είναι to Dense Linear Algebra το οποίο περιλαμβάνει αλγορίθμους που επεξεργάζονται πυκνούς πίνακες (dense arrays). Ένας τέτοιος αλγόριθμος που έχουμε χρησιμοποιήσει για να αναπτύξουμε επιταχυντές υλικού είναι ο LU Decomposition [3]. Για να είμαστε πιο ακριβείς, χρησιμοποιούμε ένα σύνολο από μετροπρογράμματα, τα OpenDwarfs, που είναι open-source υλοποιήσεις σε OpenCL των Dwarfs.

Χωρίς να μπούμε σε λεπτομέρειες σχετικά με την υλοποίηση των OpenDwarfs με την χρήση του SOpenCL, τα αποτελέσματα δείχνουν ότι οι FPGAs είναι ανταγωνιστικές με τις GPUs όσον αφορά την ταχύτητα εκτέλεσης τέτοιων αλγορίθμων. Εάν λάβουμε υπόψιν μας και την κατανάλωση ενέργειας, στις οποίες οι FPGA υπερτερούν εμφανώς των GPUs, μπορούμε να βγάλουμε το συμπέρασμα ότι η χρήση εργαλείων σαν το SOpenCL έχουν την δυνατότητα να κάνουν τις FPGA πολύ ελκυστικές για την υλοποίηση παρόμοιων εφαρμογών. Περισσότερες πληροφορίες σχετικά με το SOpenCL και τις FPGAs μπορείτε να βρείτε στο [3].

3. Βιβλιογραφία

1. Khronos OpenCL Working Group. Editor: A. Munshi, "The OpenCL Specification", Version: 1.1 Document Revision: June 11, 2010.
2. Konstantinos Krommydas, Wu-Chun Feng, Muhsen Owaida, Christos D. Antonopoulos and Nikolaos Bellas. On the Portability of OpenCL Dwarfs on Fixed and Reconfigurable Parallel Platforms. *25th IEEE International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP).* June 18-20, 2014, Zurich, Switzerland.
3. C. Lattner and V. Adve. "LLVM: A Compilation Framework for Lifelong Program Analysis Transformation, *"Proceedings of the International Symposium on Code Generation and Optimization (CGO'04)*, March 2004, pp. 75-86, Palo Alto, CA.
4. J. Llosa, A. Gonzalez, E. Ayguade, and M. Valero. "Swing Modulo Scheduling: A Lifetime-Sensitive Approach, *"Proceedings of the 1996 Conference on Parallel Architectures and Compilation Techniques (PACT)*, October, 1996, pp. 80-86, Boston, MA.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

5. Muhsen Owaida, Nikolaos Bellas, Konstantis Daloukas, Christos D Antonopoulos. Synthesis of Platform Architectures from OpenCL Programs. *IEEE Symposium on Field-Programmable Custom Computing Machines (FCCM)*, May 1-3, 2011, Salt Lake City, UT

6. Muhsen Owaida, Christos D. Antonopoulos, Nikolaos Bellas. A Grammar Induction Method for Clustering of Operations in Complex FPGA Designs. *IEEE Symposium on Field-Programmable Custom Computing Machines (FCCM), Regular paper.* May 11-13, 2014. Boston, MA

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Ζ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.1

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

Η φυσική πραγματικών και μεγάλων προβλημάτων επιβάλλει αυτά να αντιμετωπιστούν με πολλά και διαφορετικά μοντέλα, ώστε το αρχικό πρόβλημα να προσομοιωθεί και να λυθεί με το βέλτιστο δυνατό τρόπο. Η μεθοδολογία χαλάρωσης της διεπαφής αντιμετωπίζει σύνθετα προβλήματα και ορίζεται σε ένα αρκετά υψηλό επίπεδο με αποτέλεσμα να υποστηρίζει την ετερογένεια σε όλα τα επίπεδα υλοποίησης του προβλήματος. Τα Περιβάλλοντα Επίλυσης Προβλημάτων (ΠΕΠ) σχεδιάζονται και υλοποιούνται εδώ και αρκετά χρόνια και υποστηρίζουν υψηλό επίπεδο αφαίρεσης και ετερογένειας τόσο στο επίπεδο φυσικής και μαθηματικών όσο και στο επίπεδο υλοποίησης, προγραμματισμού, μηχανών εκτέλεσης, υπολογισμού και οπτικοποίησης της λύσης. 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. Οι στόχοι που απασχόλησαν τις ερευνητικές ομάδες κατά το 2014 ήταν οι ακόλουθοι:

- Επέκταση του ΠΕΠ για την υποστήριξη της κλάσης προβλημάτων ενδιαφέροντος του έργου.
- Αξιοποίηση σύγχρονου υλικού αποθήκευσης (flash storage).

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 Επέκταση του ΠΕΠ για την Υποστήριξη της Κλάσης Προβλημάτων Ενδιαφέροντος του Έργου

Ο βασικός στόχος των επεκτάσεών μας είναι η σχεδίαση και υλοποίηση ενός ανοιχτού, βελτιωμένου περιβάλλοντος μετα-υπολογισμού το οποίο θα υποστηρίζει προβλήματα πολλαπλών χωρίων / πολλαπλών τελεστών (Multi-Domain /

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Multi-Physics – MDMP), χωρίς να απαιτούνται αλλαγές στα χαμηλά επίπεδα του FEniCS (δημιουργία συστημάτων, γραμμική επίλυση συστημάτων κλπ). Η πλατφόρμα μας αξιοποιεί και επεκτείνει το Python API του Dolphin, καθώς η σύνταξη της Python είναι πλησιέστερη στη UFL, ενώ ταυτόχρονα είναι καταλληλότερη και για ταχεία ανάπτυξη κώδικα. Η υποστήριξη για προβλήματα MDMP υλοποιείται πάνω από την προυπάρχουσα λειτουργικότητα, είτε ως Python modules αξιοποιώντας υπάρχουσες δομές δεδομένων και κλάσεις, είτε ως εξωτερικές, δυναμικά διασυνδεόμενες βιβλιοθήκες C++, οι οποίες παρουσιάζονται ως Python modules με χρήση του SWIG [4].

Η πλατφόρμα στοχεύει στην υποστήριξη μεγάλου εύρους προβλημάτων με τον ίδιο γενικό σχεδιασμό. Πιο συγκεκριμένα, υποστηρίζονται περίπλοκα σχήματα για τα υποχωρία και τις διεπαφές μεταξύ τους. Επίσης υποστηρίζονται 2-διάστατες και 3-διάστατες γεωμετρίες.

Βασική προϋπόθεση για την υποστήριξη MDMP προβλημάτων είναι η δυνατότητα χρήσης διαφορετικών διαφορικών τελεστών, διαφορετικής διακριτοποίησης και ενδεχομένως και διαφορετικών επιλυτών σε κάθε υποχωρίο. Το FEniCS υποστηρίζει ήδη τον ορισμό ανεξάρτητων υποχωρίων. Η πλατφόρμα μας αξιοποιεί την υπάρχουσα υποδομή και χτίζει επάνω της.

2.1.1 Μέθοδος Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία

Υλοποιήθηκε η επαναληπτική μέθοδος additive Schwartz [5, chapter 2.1] για προσαρμογή των διεπαφών σε προβλήματα με μερικώς επικαλυπτόμενα χωρία και χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια του FEniCS για την υποστήριξη των αντίστοιχων MDMP προβλημάτων.

Η γεωμετρία, οι διεπαφές, η διακριτοποίηση, οι συνοριακές τιμές και οι εξισώσεις που ισχύουν σε κάθε υποχωρίο περιγράφονται με χρήση UFL και Dolphin σε ένα ξεχωριστό αρχείο για κάθε υποχωρίο. Αυτή η οργάνωση αντιμετωπίζει τα υποχωρία ως διακριτές μονάδες κώδικα, διευκολύνοντας την παράλληλη ή κατανεμημένη επίλυση των υποπροβλημάτων που αφορούν διαφορετικά υποχωρία.

Όλοι οι τύποι δεδομένουν που χρησιμοποιούνται είναι αντικείμενα είτε της Python είτε του FEniCS. Δεν υπάρχουν εξαρτήσεις από εξωτερικό λογισμικό.

Κάθε αντικείμενο που αντιπροσωπεύει ένα υποχωρίο πρέπει να επαναορίσει (override) έναν αριθμό μεθόδων που καλούνται εμμέσως πριν από κάθε εκτέλεση του επιλυτή.

`init()` Η μέθοδος αυτή διατηρεί τον ορισμό UFL του υποχωρίου. Θέτει ως attributes του αντικειμένου που αντιστοιχεί στο υποχωρίο το χώρο συναρτήσεων του υποχωρίου καθώς και τη γραμμική και δι-γραμμική μορφή της μερικής διαφορικής εξίσωσης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

`neighbors()` Παρέχει πληροφορία στον επιλυτή σχετικά με τα άλλα υποχωρία που επικαλύπτονται με το τρέχον, έτσι ώστε ο επιλυτής να ανανεώνει αυτόματα τις τιμές στις διεπαφές μετά από κάθε επανάληψη.

`boundaries()` Παρέχει πληροφορία στον επιλυτή σχετικά με τα τυχόν εξωτερικά σύνορα του υποχωρίου.

Το αρχικό σημείο εισόδου στον επαναληπτικό επιλυτή είναι η μέθοδος `solve()`. Λαμβάνει ως παραμέτρους ένα αντικείμενο που περιγράφει την επιθυμητή διαμόρφωση του περιβάλλοντος επίλυσης (μέγιστες επαναλήψεις, επιθυμητή ακρίβεια κλπ) και μια λίστα Python με τα υποχωρία που έχει ορίσει ο χρήστης.

Μετά από κάθε επανάληψη, για κάθε ανεξάρτητη επίλυση υποχωρίου, το σύστημα υπολογίζει έναν interpolant ο οποίος προσεγγίζει την περιγραφή της λύσης στις διεπαφές με γειτονικά υποχωρία. Ο εκάστοτε interpolant αξιοποιείται ώστε τα γειτονικά subdomains να προσαρμόσουν τις εκτιμήσεις των λύσεων στις διεπαφές πριν την επόμενη επανάληψη. Οι interpolants αποτελούν και το μοναδικό τρόπο με τον οποίο ανταλλάσσεται (ελάχιστη) πληροφορία ανάμεσα στα κατά τα άλλα ανεξάρτητα υποπροβλήματα επίλυσης στα υποχωρία.

Τέλος, μετά από κάθε επανάληψη και για κάθε ανεξάρτητη επίλυση υποχωρίου, ο αλγόριθμος ελέγχει ένα σύνολο από κριτήρια τερματισμού (σύγκλιση ή/και μέγιστος αριθμός επαναλήψεων).

Στην παράγραφο 3.1.1 παρουσιάζεται η χρήση της υποδομής Schwarz στο FEniCS για την επαναληπτική επίλυση προβλήματος μοντέλου που αποτελείται από δύο υποχωρία τριών διαστάσεων, αλλά και πραγματικού προβλήματος περιβαλλοντικής μηχανικής σε 2 διαστάσεις.

2.1.2 Υβριδική Αιτιοκρατική/Στοχαστική Μέθοδος για Προβλήματα MDMP

Εισάγαμε επεκτάσεις στο FEniCS για την υποστήριξη υβριδικής αιτιοκρατικής/στοχαστικής μεθόδου επίλυσης προβλημάτων MDMP. Πιο συγκεκριμένα, ένα στοχαστικό βήμα [10] εκτελείται για την εκτίμηση των τιμών στις διεπαφές υποχωρίων, ενώ αξιοποιείται η υπάρχουσα υποστήριξη του FEniCS στο επίπεδο των μεθόδων παρεμβολής και επίλυσης. Αυτή η αρχιτεκτονική απομονώνει το στοχαστικό βήμα της εκτίμησης των τιμών στις διεπαφές από την επίλυση αυτή καθεαυτή, και επιτρέπει την υλοποίηση του στοχαστικού βήματος σε οποιαδήποτε υπολογιστική συσκευή (συμπεριλαμβανομένων CPUs, GPUs ή ακόμα και FPGAs), έτσι ώστε να αξιοποιηθεί ο ευρείας κλίμακας παραλληλισμός που είναι διαθέσιμος στις μεθόδους Monte-Carlo. Η υλοποίησή μας περιλαμβάνει μια έκδοση PosixThreads για CPUs, καθώς και μια έκδοση OpenCL [8] για οποιαδήποτε συσκευή υποστηρίζει OpenCL (CPUs, GPUs και FPGAs).

Η λειτουργικότητα υλοποιείται σε C/C++ και προσφέρεται, με χρήση SWIG, στο Dolphin με τη μορφή μιας κλάσης Python `MC`, η οποία παρέχει τη μέθοδο

`MC::montecarlo()`. Η τελευταία δέχεται ως παράμετρο την περιγραφή της διεπαφής και επιστρέφει εκτιμήσεις για τις τιμές επάνω στη διεπαφή. Υποστηρίζονται προβλήματα έως και 3 διαστάσεων.

Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδος `montecarlo()` δέχεται της ίδιες παραμέτρους με την κλάση `DirichletBC` του FEniCS και επιπλέον μια περιγραφή του αρχικού χωρίου και του υποχωρίου ενδιαφέροντος. Με χρήση των μεθόδων της κλάσης `DirichletBC` λαμβάνουμε τα σημεία στη διεπαφή και καλούμε τη νέα μέθοδο `montecarlo()` για αυτά. Η κλήση επιστρέφει τις εκτιμώμενες τιμές όλων των σημείων (κόμβων) στη διεπαφή, με τη μορφή ενός νέου αντικειμένου `DirichletBC`, το οποίο μπορεί να χρησιμοποιηθεί οπουδήποτε στον υπόλοιπο κώδικα.

Στην παράγραφο 3.1.2 παρουσιάζεται η χρήση της υποδομής υποστήριξης υβριδικής αιτιοκρατικής/στοχαστικής μεθόδου στο FEniCS για την επίλυση υποπροβλήματος PDE με αρχική στοχαστική εκτίμηση των τιμών στη διεπαφή.

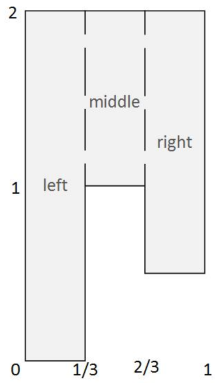
2.1.3 Μέθοδος Geometric Contraction (GEO)

Ακολουθιακή Υλοποίηση της GEO Η μέθοδος geometric (GEO) contraction [9] υλοποιείται σαν ένα πρόγραμμα FEniCS γραμμένο στη γλώσσα UML. Αξιοποιείται η υποστήριξη του Dolfin για την εισαγωγή κλάσεων χρήσιμων για τη δημιουργία των υπο-πεδίων του προβλήματος και τη δημιουργία πλεγμάτων (τριγωνικά στοιχεία) σε αυτά τα υπο-πεδία. Στη συνέχεια δηλώνουμε και εφαρμόζουμε τις οριακές συνθήκες, καθώς επίσης και τις αρχικές μαντεψιές στις διεπαφές των υπο-πεδίων. Το πρόβλημα PDE πρέπει να εκφραστεί σαν ένα παραμετρικό (variational) πρόβλημα και στη συνέχεια να οριστεί στο πρόγραμμα. Μετά τον υπολογισμό της λύσης, πραγματοποιείται και ο υπολογισμός της παραγώγου. Η δημιουργία κατάλληλων συναρτήσεων για την λήψη των τιμών της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών (όρια των υπο-προβλημάτων), ο υπολογισμός των νέων χαλαρωμένων τιμών και το πέρασμά τους πίσω στα υπο-προβλήματα σαν ανανεωμένες τιμές για τις διεπαφές ήταν οι κυριότερες προκλήσεις της υλοποίησης της GEO.

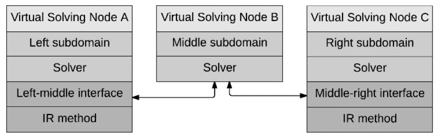
Παράλληλη Υλοποίηση της GEO Η μέθοδος GEO είναι εγγενώς παραλληλίσιμη. Στην παράλληλη υλοποίησή της κάθε κόμβος επιλύει ένα υπο-πεδίο. Οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από κάθε κόμβο (που επιλύει ένα υπο-πεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υπο-πεδία) στέλνονται σαν ένα μήνυμα RabbitMQ στους κόμβους που επιλύουν τα γειτονικά υπο-πεδία. Μια νέα επανάληψη ξεκινά μόλις οι κόμβοι που διαχειρίζονται τα γειτονικά υπο-πεδία τελειώσουν το βήμα της επικοινωνίας σχετικά με την υπολογιζόμενη λύση. Αυτή η αρχιτεκτονική, για ένα πρόβλημα μοντέλο με τρία υπο-πεδία, απεικονίζεται στο Σχήμα 1. Δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

των μηνυμάτων που ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας.



(α΄) Τοπολογία υποχωρίων



(β΄) Κατανεμημένη υλοποίηση GEO

Εικόνα 1: Αρχιτεκτονική κατανεμημένης επίλυσης για τη μέθοδο GEO σε πρόβλημα-μοντέλο με 3 υποχωρία

Στην παράγραφο 3.1.3 δίνεται ενδεικτικός κώδικας ακολουθιακής και παράλληλης υλοποίησης της GEO.

2.1.4 Μέθοδος ROB

Ακολουθιακή Υλοποίηση της ROB Η μέθοδος ROB [9] βασίζεται σε Robin συνθήκες στις διεπαφές ώστε να δώσει πληροφορία από τη διεπαφή του ενός υπο-πεδίου στο άλλο. Υλοποιείται με τρόπο παρόμοιο με αυτόν που περιγράφηκε για τη GEO. Η τοπική ΜΔΕ στα υποπεδία λύνεται χρησιμοποιώντας Robin συνθήκες στις διεπαφές, αντιστοιχίζοντας ένα συνδυασμό από Dirichlet και Neumann δεδομένα από τα γειτονικά υποπεδία

Παράλληλη Υλοποίηση της ROB Η επίλυση του κάθε υποπεδίου είναι ανεξάρτητη από των υπολοίπων, οπότε η μέθοδος ROB προσφέρεται για παραλληλοποίηση. Παρόμοια και με την παράλληλη υλοποίηση της GEO, οι υπολογισμένες τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών από κάθε κόμβο (που επιλύει ένα υπο-πεδίο που έχει παραπάνω από ένα γειτονικά υπο-πεδία) στέλνονται σαν ένα μήνυμα RabbitMQ, έτσι ώστε η νέα επανάληψη να ξεκινήσει και στον άλλο κόμβο. Και πάλι το σχήμα δεν εμπεριέχει ξεχωριστούς κόμβους για να διαχειρίζονται τις διεπαφές και εξυπηρετεί στη μείωση του αριθμού των μηνυμάτων που ανταλλάσσονται, σε μια προσπάθεια να ελαχιστοποιηθεί ο συνολικός χρόνος επικοινωνίας.

2.2 Αξιοποίηση Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης

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

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

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

Μελετήσαμε την επίλυση αραιών συστημάτων με τα πακέτα: MUMPS [1] [2], την έκδοση του PARDISO [6] [7] που περιλαμβάνεται στην INTEL MKL και το WSMP [3] της IBM. Το PARDISO και το MUMPS υποστηρίζουν την επίλυση συμμετρικών και μη συμμετρικών συστημάτων, ενώ το WSMP υποστηρίζει μόνο συμμετρικά συστήματα. Πραγματοποιήσαμε πειράματα σε μαγνητικό σκληρό δίσκο και σε οδηγό στερεάς κατάστασης (flash SSD) και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στην Παράγραφο 3.2.

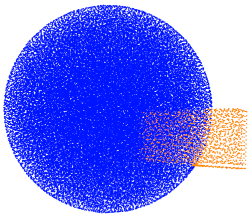
3 Πειραματικά Αποτελέσματα

3.1 Επέκταση του ΠΕΠ για την Υποστήριξη της Κλάσης Προβλημάτων Ενδιαφέροντος του Έργου

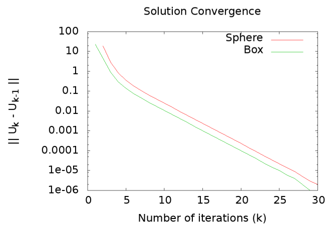
3.1.1 Μέθοδος Schwarz για Προβλήματα με Επικαλυπτώμενα Υποχωρία

Χρήση σε 3D πρόβλημα-μοντέλο Ας θεωρήσουμε ένα μοντέλο 3-διάστατο πρόβλημα με 2 υποχωρία: μία σφαίρα και ένα παραλληλεπίπεδο, τα οποία επικαλύπτονται μερικώς όπως φαίνεται στην Εικόνα 2(α΄). Οι Εικόνες 2(γ΄) και 2(δ΄) απεικονίζουν τη λύση για τα δύο υποχωρία με χρήση του επαναληπτικού επιλυτή

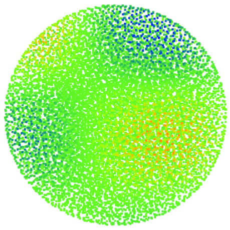
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



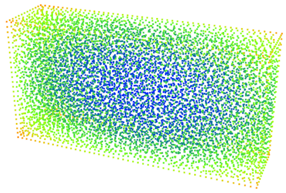
(α΄) Τοπολογία υποχωρίων



(β΄) Ρυθμός σύγκλισης για τα δύο υποπροβλήματα



(γ΄) Η λύση για το υποχωρίο σφαίρα



(δ΄) Η λύση για το υποχωρίο παραλληλεπίπεδο

Εικόνα 2: Ένα μοντέλο 3-διάστατο πρόβλημα με μερικώς επικαλυπτόμενα υποχωρία

Schwarz που υλοποιήθηκε στο FEniCS. Στην Εικόνα 2(β΄) παρουσιάζεται ο ρυθμός σύγκλισης για τα 2 υποπροβλήματα, έως την επίτευξη της επιθυμητής από το χρήστη ακρίβειας.

Κώδικας 1: Ορισμός του παραλληλεπίπεδου υποχωρίου αξιοποιώντας ένα αρχείο-σκελετό.

```
# user defined methods
def OveralappingWithOther(): pass
def userDefinedUFL(): pass
def userDefinedBoundaryCondition(): pass

# skeleton example
def ExtBC(x,on_boundary):
    return on_boundary and not OveralappingWithOther()

def ExtIface(x,on_boundary):
    return on_boundary and OveralappingWithOther()

class Problem(ConfigCommonProblem):
        # Override the API methods init(), neighbours()
    # and boundaries()
        def init(self,*args,**kwargs):
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

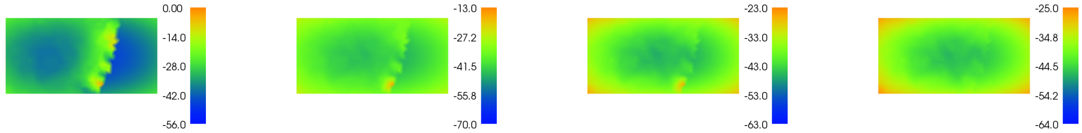
```
        self.domain_name = 'box'
        mesh = Mesh(Box(-2,-1,-.5,2,1,.5),128)
        self.V = FunctionSpace(mesh,'Lagrange',1)
        self.a, self.L = userDefinedUFL(V)

    # return a dictionary with interfaces for each neighbour
    def neighbours(self):
        interface = {}
        interface[self.domain_name] = ExtIface
        return interface

        # return a list with all the external boundaries
    def boundaries(self):
        bc = DirichletBC(self.V, userDefinedBoundaryCondition(), ExtBC)
        return [ bc ]
```

Ο Κώδικας 1 αντιστοιχεί στον ορισμό του παραλληλεπίπεδου υποχωρίου (box3D_1.py), ξεκινώντας από έναν κοινό (ανεξάρτητο του υποχωρίου) σκελετό. Παρόμοιος είναι και ο ορισμός του υποχωρίου που αντιστοιχεί στη σφαίρα (sphere3D_1.py).

Κώδικας 2: Επίλυση 3D προβλήματος με 2 μερικώς αλληλεπικαλυπτόμενα υποχωρία.

```
from dolfin import *
import solverconfig
import solver

client = hmc.LocalClient()

import sphere3D_1 as sphere
import box3D_1 as box

sp = sphere.Problem(client=client)
bp = box.Problem(client=client)
subdomains=[ sp, bp ]

config = solverconfig.Config3D()
solver.solve(subdomains=subdomains, config=config)
```

Ο Κώδικας 2 οδηγεί τον επαναληπτικό επιλυτή, δεδομένων των ορισμών των υποχωρίων. Η απαιτούμενες αλλαγές από το χρήστη στους 2 σκελετούς απεικονίζονται με έντονους χαρακτήρες. Τα υποχωρία μπορούν να διαθέτουν – και διαθέτουν στο συγκεκριμένο παράδειγμα – διαφορετικά πλέγματα, διακριτοποιήσεις και PDEs.



(α΄) Επανάληψη 1 (β΄) Επανάληψη 2 (γ΄) Επανάληψη 3 (δ΄) Επανάληψη 38

Εικόνα 3: Στιγμιότυπα οριζόντιας τομής του παραλληλεπιπέδου σε διαφορετικές επαναλήψεις του επιλυτή

Στην Εικόνα 3 απεικονίζεται οριζόντια τομή του παραλληλεπιπέδου σε διαφορετικές επαναλήψεις (1, 2, 3 και 38) του επαναληπτικού επιλυτή. Μπορεί εύκολα κανείς να παρατηρήσει την αρχική έντονη ασυνέχεια στο τόξο τομής με τη σφαίρα, η οποία εξομαλύνεται στις μετέπειτα επαναλήψεις.

3.1.2 Υβριδική Αιτιοκρατική/Στοχαστική Μέθοδος για Προβλήματα MDMP

Ο κώδικας 3 επιδεικνύει τη χρήση της αιτιοκρατικής / στοχαστικής μεθόδου που υλοποιήθηκε στο FEniCS για τη λύση μιας PDE σε ένα εσωτερικό, τετράγωνο υποχωρίο ενός μεγαλύτερου χωρίου. Πριν τη λύση στο υποχωρίο εκτιμώνται, με στοχαστικό τρόπο, οι τιμές στη διεπαφή του εσωτερικού υποχωρίου. Οι αλλαγές που εισάγονται από τις επεκτάσεις μας διακρίνονται, και πάλι, με χρήση έντονων χαρακτήρων.

Κώδικας 3: Παράδειγμα χρήσης της μεθόδου montecarlo().

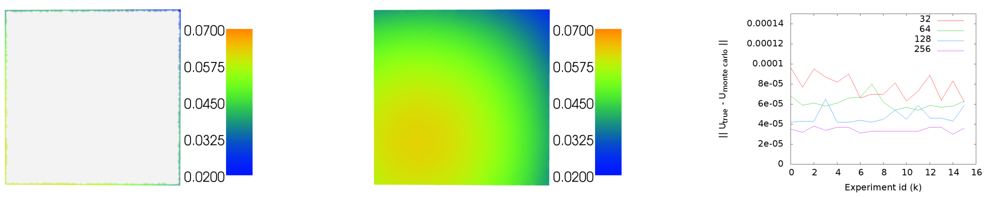
```
from dolfin import *
import hybridmc as hmc  # the platform's Python module

def onbc(x,on_boundary):
    return on_boundary

def mc_test_2D(Omega, Subdomain):
    x, y = variable(Expression("x[0]")),
           variable(Expression("x[1]"))
    expr = (x)*(x-1)*(y)*(y-1)

    mesh = Mesh(SubDomain,128)
    V = FunctionSpace(mesh,'Lagrange',1)

    u, v = TrialFunction(V), TestFunction(V)
    f = -Laplacian(expr,x,y)
    a = inner(grad(u), grad(v))*dx
    L = f*v*dx
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
19
20      # get expressions as strings
21      f_expr, q_expr = hmc.tools.cppcode(expr,x,y),
22                       hmc.tools.cppcode(f,x,y)
23      mcbc, est = client.montecarlo(V, onbc, OpenCL=True, Omega=Omega,
24                                     f=f_expr, q=q_expr)
25      sol_mc = Function(V)
26      solve(a==L,sol_mc,[ mcbc ])
27
28  if __name__ == '__main__':
29      Omega2D = [ 1., 1. ]
30      SubDomain2D = Rectangle(.4, .8, .4, .8)
31      client = hmc.LocalClient()
32      mc_test_2D(Omega2D, Subdomain2D)
```

Το αντικείμενο `client` στη γραμμή 29 αναδεικνύει τη δυνατότητα τοπικής ή απομακρυσμένης υλοποίησης της μεθόδου.

Η Εικόνα 4 περιλαμβάνει την εκτίμηση της στοχαστικής μεθόδου για τις τιμές στη διεπαφή του εσωτερικού υποχωρίου, τη λύση που επιτεύχθηκε από την υβριδική αιτιοκρατική / στοχαστική μέθοδο για το πρόβλημα-μοντέλο που περιγράφεται από τον Κώδικα 3, καθώς και το απόλυτο σφάλμα σε σχέση με έναν πλήρως αιτιοκρατικό επιλυτή για ένα σύνολο 16 πειραμάτων.



(α΄) Στοχαστική εκτίμηση τιμών στη διεπαφή του εσωτερικού υποχωρίου

(β΄) Λύση στο εσωτερικό υποχωρίο από τον υβριδικό επιλυτή

(γ΄) Σφάλμα λύσης σε σχέση με πλήρως αιτοκρατικό επιλυτή. Διαφορετικές γραμμές αντιστοιχούν σε διαφορετικές πυκνότητες του υπολογιστικού πλέγματος

Εικόνα 4: Στοχαστική εκτίμηση, υβριδική λύση και σφάλμα λύσης σε σχέση με αιτιοκρατικό επιλυτή

3.1.3 Μέθοδος Geometric Contraction (GEO)

Ακολουθιακή υλοποίηση της GEO Σε αυτή την παράγραφο παρέχονται ενδεικτικά στιγμιότυπα κώδικα από την υλοποίηση της μεθόδου GEO στο FEniCS.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Οι ανανεωμένες τιμές σε ένα σημείο της διεπαφής υπολογίζονται ως εξής:

$$u^{(k+1)}(x) = u^{(k)}(x) - \rho(\frac{\partial u_L^{(k)}(x)}{\partial n} - \frac{\partial u_R^{(k)}(x)}{\partial n}), k = 1, 2, ... \quad (1)$$

που k είναι η επανάληψη, u είναι η υπολογισμένη λύση στο σημείο της διεπαφής x, $\frac{\partial u_L^{(k)}(x)}{\partial n} - \frac{\partial u_R^{(k)}(x)}{\partial n}$ είναι οι τιμές των προς τα έξω κανονικών παραγώγων στα δύο γειτονικά υποπεδία και ρ είναι η παράμετρος χαλάρωσης που χρησιμοποιείται για να επιταχύνει τη σύγκλιση. Μια νέα επανάληψη ξεκινάει με το που περαστούν οι χαλαρωμένες τιμές των διεπαφών πίσω στα υπο-πεδία.

Πιο αναλυτικά, τμήματα του FEniCS προγράμματος που υλοποιεί τα παραπάνω παρουσιάζεται στη συνέχεια. Αρχικά γίνεται η δημιουργία των υπο-πεδίων. Ενδεικτικά παρουσιάζουμε τη δημιουργία του αριστερού υπο-πεδίου για το ομοιόμορφο πρόβλημα και για την περίπτωση, όπου $h = 0.5$.

```
meshdown = RectangleMesh(0, 0, 0.3333, 2, 7, 40, 'left')
Vdown = FunctionSpace(meshdown, 'Lagrange', 1)
```

Στη συνέχεια ορίζουμε τις οριακές συνθήκες και τις συνθήκες των διεπαφών. Ενδεικτικά, η πρώτη (αριστερή) διεπαφή:

```
int1_expr = Expression('4135.5*x[1]-6077.6')
class Interface1(SubDomain):
      def inside(self, x, on_boundary):
            return on_boundary and abs(x[0] - 0.3333) < tol
                   and abs(x[1] - 2) > tol
                   and abs(x[1] - 1.5) > tol
Gamma_4_left = DirichletBC(Vdown, int1_expr, Interface1())
```

Ακολουθεί ο ορισμός του παραμετρικού προβλήματος. Πάλι για το αριστερό υπο-πεδίο του ομοιόμορφου προβλήματος:

```
u = TrialFunction(Vdown)
v = TestFunction(Vdown)
f = interpolate(f_expr, Vdown)
a = (inner(nabla_grad(u), nabla_grad(v))+g2*inner(u, v))*dx
L = f*v*dx
```

Και στη συνέχεια ο υπολογισμός της λύσης:

```
u = Function(Vdown)
solve(a == L, u, bcsdown)
```

Και της παραγώγου:

```
V_g = VectorFunctionSpace(meshdown, 'Lagrange', 1)
v = TestFunction(V_g)
w = TrialFunction(V_g)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
a = inner(w, v)*dx
L = inner(grad(u), v)*dx
grad_u = Function(V_g)
solve(a == L, grad_u)
```

Παρουσιάζεται ο τρόπος με τον οποίο λαμβάνουμε τις τιμές της λύσης και της παραγώγου στα σημεία των διεπαφών:

```
vertex_to_dof_map = Vdown.dofmap().vertex_to_dof_map(meshdown)
dof_to_vertex_map = Vdown.dofmap().dof_to_vertex_map(meshdown)
m = u.vector()
dofs_at_vertices = m[dof_to_vertex_map]
coor = meshdown.coordinates()

grad_u_x, grad_u_y = grad_u.split(deepcopy=True)

for vdown in vertices(meshdown):
        ldown = coor[vdown.index()
                ldown[0], ldown[1],
                dofs_at_vertices[vdown.index()],
                dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()],
                dofs_at_vertices_g_y_down[vdown.index()]]
```

Και ακολουθεί ο τρόπος που τις επαναθέτουμε, αφού τις επεξεργαστούμε:

```
downbound=(dofs_at_vertices[vdown.index()]+
           dofs_at_vertices_up[vup.index()])/2+
           omega*(-dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()]+
           dofs_at_vertices_g_x_up[vup.index()])

upbound=(dofs_at_vertices[vdown.index()]+
         dofs_at_vertices_up[vup.index()])/2+
         omega*(-dofs_at_vertices_g_x_down[vdown.index()]+
         dofs_at_vertices_g_x_up[vup.index()])

u.vector().set_local(dofs_at_vertices.array()[vertex_to_dof_map])
downbound=Function(Vdown)
downbound.assign(u)
```

Παράλληλη υλοποίηση της GEO Ενδεικτικά τμήματα του κώδικα της παράλληλης υλοποίησης της GEO, δίνονται παρακάτω.

Ο client αρχικοποιεί την επικοινωνία:

```
def __init__(self):
        self.credentials = pika.PlainCredentials('test', 'test')
        self.connection = pika.BlockingConnection(
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

```
                pika.ConnectionParameters('150.140.139.89',5672,
                                          '/',
                                          self.credentials))
        self.channel = self.connection.channel()
        result=self.channel.queue_declare(exclusive=True)
        self.callback_queue = result.method.queue
        self.channel.basic_consume(self.on_response, no_ack=True,
                                   queue=self.callback_queue)
        self.connection2= pika.BlockingConnection(
                pika.ConnectionParameters('150.140.139.89',
                                          5672,
                                          '/',
                                          self.credentials))
        self.channel2 = self.connection2.channel()
        result2=self.channel2.queue_declare(exclusive=True)
        self.callback_queue2 = result2.method.queue
        self.channel2.basic_consume(self.on_response,
                                    no_ack=True,
                                    queue=self.callback_queue2)
```

Περιμένει τις απαντήσεις από τους servers:

```
def on_response(self, ch, method, props, body):
  #print "on_response result ch=%s guess=%s" % (ch,self.channel)
    if ch == self.channel:
      self.response = body
    else:
      self.response2 = body
```

Αφού πρώτα τους στείλει τις τιμές στις διεπαφές που υπολόγισε επιλύοντας το πρόβλημα στην εκάστοτε επανάληψη:

```
self.response = None
self.corr_id = str(uuid.uuid4())
self.channel.basic_publish(
    exchange='',
    routing_key='hello',
    properties=pika.BasicProperties(
                        reply_to = self.callback_queue,
                        correlation_id = self.corr_id),
    body=inter2)
```

Αντίστοιχα ο κάθε server επιλύει το πρόβλημά του, λαμβάνει από τον client τη λύση και την παράγωγο που υπολόγισε στη διεπαφή και υπολογίζει τις καινούργιες τιμές στη διεπαφή:

```
response=(interfaceup+interfaced)/2+
            omega*(-gradientd+gradientup)
```

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Το αποτέλεσμα αυτό το χρησιμοποιεί για την επόμενη επανάληψή του. Το στέλνει, όμως και στον client για να προχωρήσει και αυτός με την επόμενη επανάληψη του.

```
ch.basic_publish(exchange='',
    routing_key=props.reply_to,
    properties=pika.BasicProperties(correlation_id =
                                    props.correlation_id),
    body=json.dumps(response.tolist()))
ch.basic_ack(delivery_tag = method.delivery_tag)
```

3.2 Αξιοποίηση Σύγχρονων Μέσων Αποθήκευσης

Τα πειράματα πραγματοποιήθηκαν σε δύο σταθμούς εργασίας DELL Precision T3500 με 8GB of DDR3 RAM και έναν τετρα-πύρηνο Intel Xeon W3550 3.06GHz το καθένα. Ο πρώτος σταθμός εργασίας διαθέτει έναν οδηγό SSD Intel 520 240GB, SATA-III, και έναν οδηγό OCZ Revodrive 350 PCIe 480GB ως επιπλέον αποθηκευτικό μέσο. Ο δεύτερος σταθμός εργασίας διαθέτει έναν σκληρό Seagate Barracuda 7200rpm 1TB. Και οι δύο σταθμοί χρησιμοποιούν Centos 6.5 με kernel 2.6.32-431.el6.x86_64 για λειτουργικό σύστημα και έχουν διαμορφωθεί ώστε να χρησιμοποιούν μέχρι 8GB swap.

Οι αραιοί πίνακες που χρησιμοποιηθήκαν στα πειράματα προέρχονται από τις συλλογές, του Πανεπιστημίου της Φλόριντα[1] και του ερευνητικού προγράμματος GRID-TLSE[2]. Οι ιδιότητές των αραιών πινάκων συνοψίζονται στον Πίνακα 1.

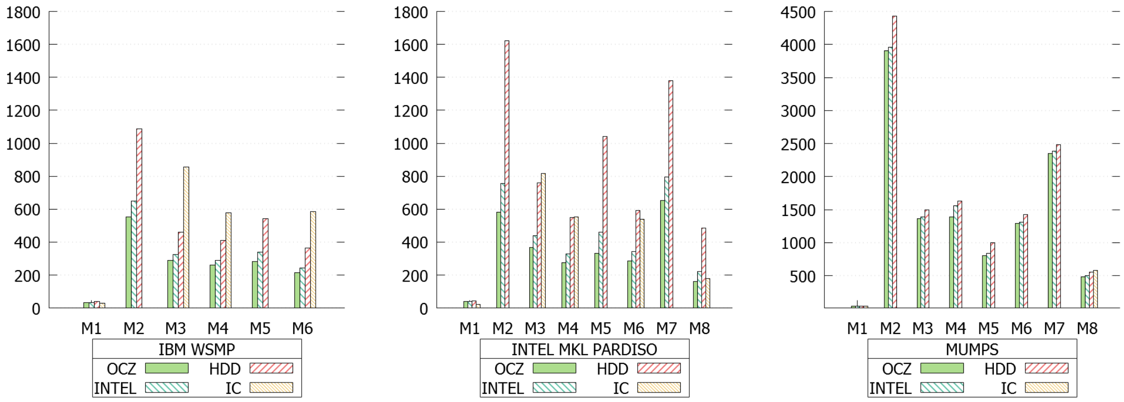
MATRIX		TYPE	$N(A)$	$NNZ(A)$	DESCRIPTION
INLINE_1	M1	RSPD	5.04E+05	1,87E+07	Structural
ASTER_PERF011A	M2	RSI	8,54E+05	7,11E+07	Structural engineering
AUDIKW_1	M3	RSI	9,44E+05	3,93E+07	Automotive model
NICE20MC	M4	RSI	7,16E+05	2,81E+07	Earthquake analysis
FLAN_1565	M5	RSPD	1,56E+06	1,14E+08	Structural
STOCF_1465	M6	RSPD	1,47E+06	2,10E+07	Fluid dynamics
ATMOSMODL	M7	RUI	1,49E+06	1,03E+07	Atmospheric modeling
ASTER_PERF002C	M8	RSI	1,0E+6	3,79E+07	Structural engineering

Πίνακας 1: Αραιοί Πίνακες

Για την επίλυση των συστημάτων στην κύρια μνήμη (in-core) χρησιμοποιήθηκε ο σταθμός εργασίας με τους δίσκους στερεάς κατάστασης. Στην Εικόνα 5 παρουσιάζονται οι χρόνοι επίλυσης (wall-clock time) για τα τρία πακέτα λογισμικού.

[1] http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/
[2] http://gridtlse.enseeiht.fr/

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

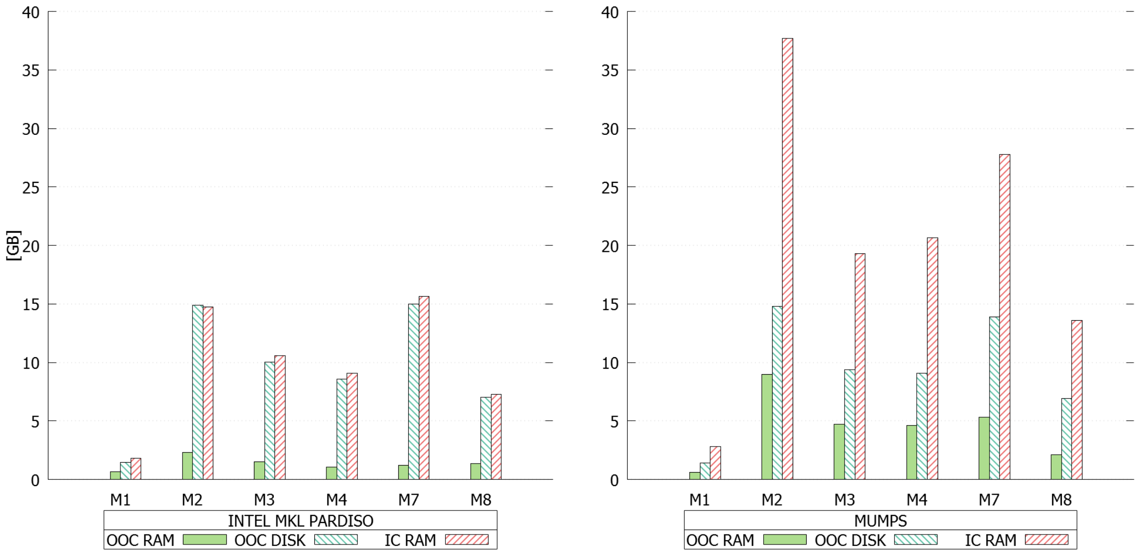


Εικόνα 5: Χρόνοι επίλυσης στη RAM σε HDD και flash SSD

Σε όλες σχεδόν τις περιπτώσεις η χρήση της flash οδηγεί σε σημαντική μείωση του χρόνου επίλυσης των συστημάτων σε σχέση με τον μαγνητικό δίσκο. Στο PARDISO, η επίλυση στην flash είναι δύο με τρεις φορές γρηγορότερη απ' ότι στον σκληρό δίσκο, στο WSMP ως και δύο φορές ταχύτερη, ενώ μικρότερη είναι η διαφορά στο MUMPS, αλλά παραμένει σημαντική. Σε όλες τις περιπτώσεις η επιτάχυνση είναι μικρότερη για το σύστημα M1, καθώς το μικρό του μέγεθός του ελαχιστοποιεί την πρόσβαση στην εξωτερική μνήμη. Η επίλυση στην κύρια μνήμη είναι γρηγορότερη εφόσον το μέγεθος την μνήμης που απαιτείται δεν υπερβαίνει την διαθέσιμη RAM, διαφορετικά χρησιμοποιείται εικονική μνήμη (swap) και η επίλυση καθυστερεί σημαντικά (π.χ. περίπτωση M3 & M4 στο WSMP και PARDISO). Στην περίπτωση δε, που η απαιτούμενη μνήμη υπερβαίνει το άθροισμα κύριας και εικονικής μνήμης δεν είναι δυνατή η επίλυση του συστήματος, για παράδειγμα μόνο τα συστήματα M1 και M8 κατέστη δυνατό να επιλυθούν με το MUMPS στην κύρια μνήμη. Οι απαιτήσεις σε κύρια και δευτερεύουσα μνήμη για το PARDISO και το MUMPS παρουσιάζονται στην Εικόνα 6, για το WSMP δεν ήταν δυνατό να έχουμε άμεσα συγκρίσιμες πληροφορίες.

Συνοψίζοντας, τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η επίλυση μεγάλων αραιών συστημάτων γραμμικών εξισώσεων μπορεί να ωφεληθεί σημαντικά από την αξιοποίηση νέων τεχνολογιών, όπως οι μνήμες flash. Ωστόσο, είναι αναγκαία η περαιτέρω μελέτη των αλγορίθμων εξωτερικής μνήμης με σκοπό την βελτιστοποίησή τους γι' αυτό το νέο μέσο. Επιπλέον, τα πειράματα δείχνουν ότι η αποδοτική επίλυση ενός αραιού συστήματος απαιτεί την προσεκτική επιλογή του κατάλληλου αλγορίθμου (in-core/out-of-core) ανάλογα με το διαθέσιμο υλικό (hardware).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Εικόνα 6: Απαιτήσεις σε κύρια και δευτερεύουσα μνήμη

4 Παραδοτέα

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

Ετήσια τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων: το παρόν κείμενο.

Πρότυπο λογισμικό για Περιβάλλον Επίλυσης Προβλημάτων το οποίο περιλαμβάνει τα ακόλουθα επιμέρους στοιχεία:

- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη προβλημάτων MDMP (μέθοδοι Schwarz, υβριδική αιτιοκρατική/στοχαστική, GEO, ROB).
- Προσθήκες στην πλατφόρμα FEniCS για την υποστήριξη εναλλακτικών αρχιτεκτονικών (επέκταση Whale).

Πλέον των παραδοτέων που προέβλεπε το τεχνικό δελτίο, στα πλαίσια της δράσης παρήχθη και η ακόλουθη δημοσίευση:

- Athanasios Fevgas, Panagiota Tsompanopoulou, Panayiotis Bozanis, ”Exploring the Performance of Out-of-Core Linear Algebra Algorithms in Flash based Storage”, 6th International Conference on Numerical Analysis (NumAn 2014), 02-05 Sep 2014, Chania, Crete, Greece.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Υλοποίηση Μεθόδου GEO		x	x
Υλοποίηση Μεθόδου ROB		x	x
Υλοποίηση Μεθόδου Schwarz	x	x	
Υλοποίηση Μεθόδου Hybrid		x	x
Υποστήριξη Flash Storage		x	

Πίνακας 2: Συνεργασίες στα πλαίσια της Δράσης 4.1.

5 Συνεργασίες

Η Δράση 4.1 είναι κεντρική στο έργο MATENVMED καθώς καλείται να ενοποιήσει και να συγκεράσει τις ερευνητικές προσπάθειες που αναπτύσσονται στις υπόλοιπες δράσεις του έργου. Σε αυτά τα πλαίσια, ενθάρρυνε τη συνεργασία μεταξύ και των 3 ερευνητικών ομάδων. Πιο συγκεκριμένα, 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 κατά το 2014 επεκτάθηκε το FEniCS με μεθόδους απαραίτητες για την υποστήριξη των εφαρμογών στις οποίες στοχεύει το έργο MATENVMED. Επίσης, εξετάστηκε η αξιοποίηση από το FEniCS μοντέρνων, γρήγορων συσκευών αποθήκευσης.

Βασικές επιδιώξεις για το επόμενο έτος είναι:

- Η υποστήριξη και η αξιοποίηση υποδομών και υπηρεσιών cloud από το προτεινόμενο περιβάλλον επίλυσης προβλημάτων.
- Η αξιοποίηση του περιβάλλοντος για την αντιμετώπιση των κεντρικών εφαρμογών του έργου.

Αναφορές

[1] Patrick R Amestoy, Iain S Duff, Jean-Yves L'Excellent, and Jacko Koster. A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(1):15–41, 2001.

[2] Patrick R Amestoy, Abdou Guermouche, Jean-Yves L'Excellent, and Stephane Pralet. Hybrid scheduling for the parallel solution of linear systems. *Parallel computing*, 32(2):136–156, 2006.

[3] Haim Avron and Arpan Gupta. Managing data-movement for effective shared-memory parallelization of out-of-core sparse solvers. In *High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC), 2012 International Conference for*, pages 1–11. IEEE, 2012.

[4] David M. Beazley. Swig: An easy to use tool for integrating scripting languages with c and c++. In *Proceedings of the 4th Conference on USENIX Tcl/Tk Workshop, 1996 - Volume 4*, TCLTK'96, pages 15–15, Berkeley, CA, USA, 1996. USENIX Association.

[5] X. Cai. Overlapping domain decomposition methods. In HansPetter Langtangen and Aslak Tveito, editors, *Advanced Topics in Computational Partial Differential Equations*, volume 33 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, pages 57–95. Springer Berlin Heidelberg, 2003.

[6] Olaf Schenk. Scalable parallel sparse lu factorization methods on shared memory multiprocessors. Technical report, ETH. Zurich, 2000.

[7] Olaf Schenk and Klaus Gartner. Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with pardiso. *Future Generation Computer Systems*, 20(3):475–487, 2004.

[8] John E. Stone, David Gohara, and Guochun Shi. Opencl: A parallel programming standard for heterogeneous computing systems. *IEEE Des. Test*, 12(3):66–73, May 2010.

[9] Panagiota Tsompanopoulou and Emmanouil Vavalis. "analysis of an interface relaxation method for composite elliptic differential equations". *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 226(2):370–387, 2009.

[10] Manolis Vavalis. Implementing hybrid PDE solvers, 08 2014.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Η΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.2

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

1 Σκοπός

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

Την τρέχουσα περίοδο τα κύρια ερευνητικά αποτελέσματα αναφέρονται:

- Στην συνδυασμό αριθμητικών σχημάτων χρονικής διακριτοποίησης τύπου IMEX Runge-Kutta και της ασυνεχούς μεθόδου dDHC (βλ. Τεχνική Έκθεση 2014 Δράσης 2.1) για την επίλυση μη-γραμμικών μοντέλων εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes). Κύριος στόχος η μείωση του υπολογιστικού κόστους χωρίς επίδραση στην ευστάθεια και τάξη σύγκλισης των μεθόδων.

- Στην απεικόνιση των dDHC εξισώσεων που προκύπτουν από γραμμικά μοντέλα εξέλιξης καρκινικών όγκων εγκεφάλου στις 2+1 διαστάσεις (τύπου stripes) σε παράλληλες υπολογιστικές αρχιτεκτονικές που διαθέτουν γραφικούς επιταχυντές τύπου GPU.

- Στην ανάπτυξη αλγορίθμων αναγνώρισης περιοχών λευκής και φαιάς ουσίας του εγκεφάλου από MRI απεικονίσεις. Ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση των περιοχών αυτών του εγκεφάλου καθώς και επιτυχή εισαγωγή του προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS.

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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

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

1.3 Αναγνώριση, Ψηφιοποίηση και Διακριτοποίηση Ετερογενών Περιοχών MRI Απεικόνισης Εγκεφάλου

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

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

2 Μεθοδολογία

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

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

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

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

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

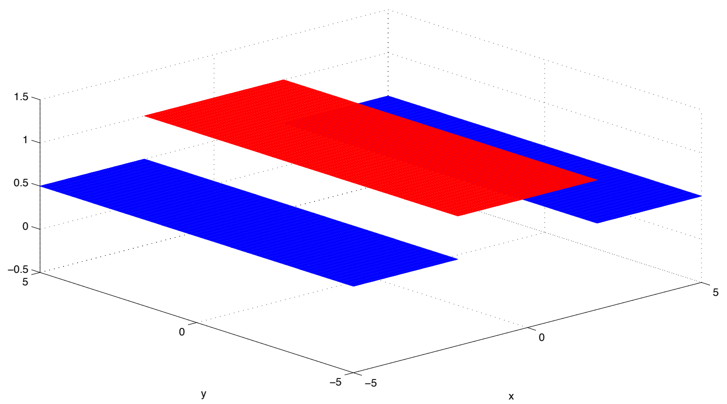
$$x = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}}\bar{x} \ , \ y = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}}\bar{y} \ , \ t = \rho\bar{t}$$

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

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

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

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



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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

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

όπου

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

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

Γράφοντας στη συνέχεια το παραπάνω σύστημα ΣΔΕ ως

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

με

$$\mathcal{L}_d\left(\boldsymbol{\alpha}\right) := A_{\tilde{0}0}^{-1}\left(D_x A_{\tilde{2}0} + D_x A_{\tilde{0}2} + A_{\tilde{0}0}\right)\boldsymbol{a}$$

και

$$\mathcal{N}_d\left(\boldsymbol{\alpha}\right) := -A_{\tilde{0}0}^{-1}\left[\left(A_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}\right) \circ \left(A_{\tilde{0}0}\boldsymbol{a}\right)\right]$$

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

IMEX(3,3,2) RK

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

IMEX(4,3,3) RK

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

όπου, $\lambda = 1 - \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\lambda_1 = 0.24169426078821$, $\lambda_2 = 0.06042356519705$ and $\lambda_3 = 0.12915286960590$.
Όπως εύκολα μπορεί να παρατηρήσει κανείς, τα σχήματα IMEX διατηρούν όλα τα αλγεβρικά συστήματα που εμπλέκονται στο σχήμα γραμμικά.

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

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

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

ή, ισοδύναμα,

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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

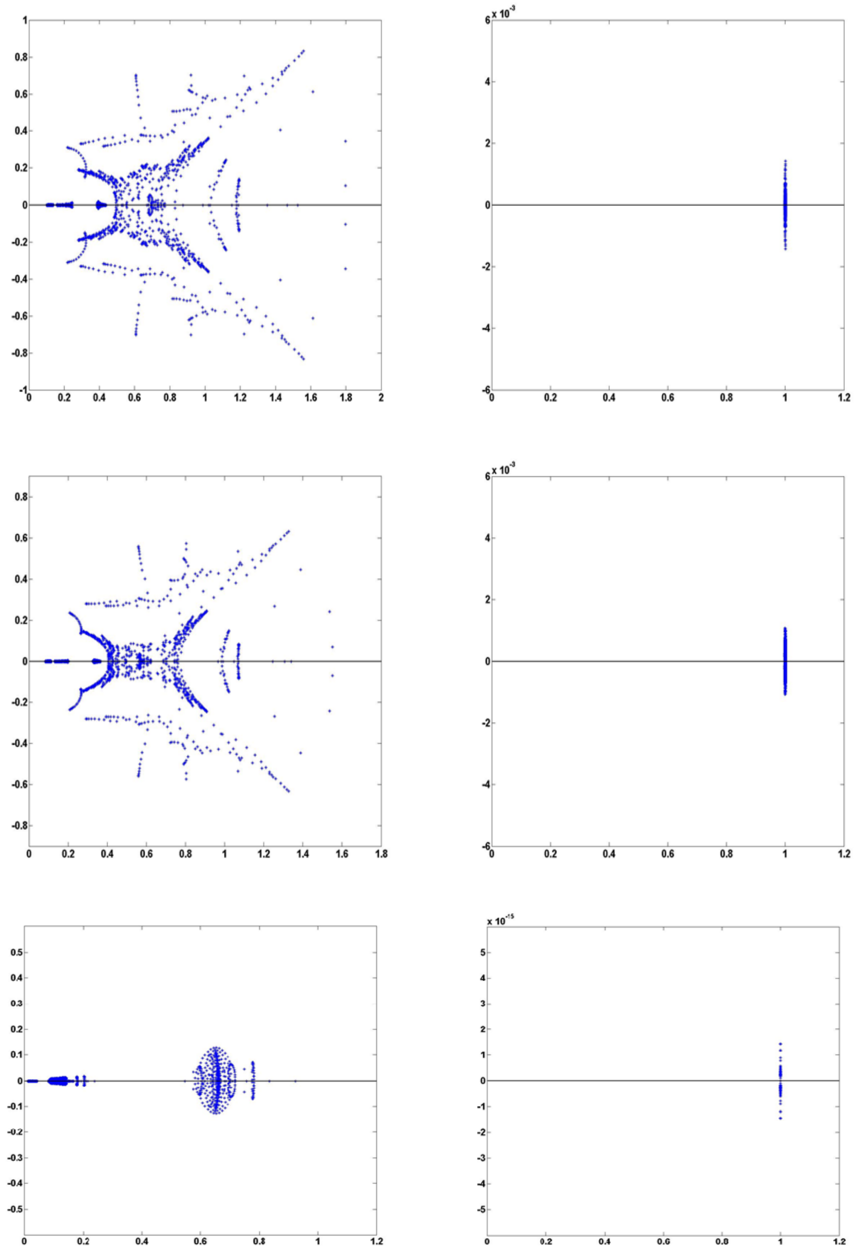
$$\begin{aligned} A\,\boldsymbol{a}^{(n,1)} &= A_0\,\boldsymbol{a}^{(n)} \\ A\,\boldsymbol{a}^{(n,2)} &= A_0\,\boldsymbol{a}^{(n)} + \tau(1-2\lambda)B\,\boldsymbol{a}^{(n,1)} \quad . \\ A_0\,\boldsymbol{a}^{(n+1)} &= A_0\,\boldsymbol{a}^{(n)} + \frac{\tau}{2}\,B\,(\boldsymbol{a}^{(n,1)} + \boldsymbol{a}^{(n,2)}) \end{aligned} \tag{7}$$

όπου $\tau := \Delta t \equiv dt$ συμβολίζει το χρονικό βήμα, $A := A_0 - \tau\lambda B$, και $\lambda = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}$.

Για την επίλυση του παραπάνω συστήματος γραμμικών εξισώσεων προτείνεται ο ακόλουθος αλγόριθμος:

<u>Δημιουργία Πινάκων</u> A, A_b, A_0, B <u>και</u> $\boldsymbol{a_{old}}$
for $t = dt$ **to** t_{max} **με χρονικό βήμα** dt
  <u>Υπολογισμός</u> $\boldsymbol{a_0} = A_0\boldsymbol{a_{old}}$
  if $t \leq 2dt$ **then**
    <u>Επίλυση</u> $A_b\boldsymbol{a_{new}} = \boldsymbol{a_0}$
  else
    <u>Επίλυση</u> $A\,\boldsymbol{a_1} = \boldsymbol{a_0}$
    <u>Υπολογισμός</u> $\tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{a_0} - dt\sqrt{3}B\boldsymbol{a_1}$
    <u>Επίλυση</u> $A\,\boldsymbol{a_2} = \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}}$
    <u>Υπολογισμός</u> $\boldsymbol{a_2} = \boldsymbol{a_0} + \frac{dt}{2}B(\boldsymbol{a_1} + \boldsymbol{a_2})$
    <u>Επίλυση</u> $A_0\,\boldsymbol{a_{new}} = \boldsymbol{a_2}$
  endif
  <u>Υπολογισμός</u> $\boldsymbol{a_{old}} = \boldsymbol{a_{new}}$
endfor

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



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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

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

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

Παράλληλος Αλγόριθμος

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

Ο παράλληλος αλγόριθμος που ακολουθεί περιγράφει την κατασκευή των πινάκων A_b, A_0, A, B και του διανύσματος $\boldsymbol{a_{old}}$ καθώς και τον υπολογισμό της iLU πραγοντοποίησης των πινάκων που πραγματοποιείται στο CPU. Τα δεδομένα αντιγράφονται στη μνήμη του γραφικού υποσυστήματος πριν την έναρξη της χρονικής διαδικασίας και από 'κει και έπειτα η συντριπτική πλειοψηφία των

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

Δημιουργία πινάκων στο CPU A_b, A_0, A, B *και* $\boldsymbol{a_{old}}$

Υπολογισμός στο CPU των iLU παραγοντοποιήσεων των A_b, A_0 *και* A

Αντιγραφή των πινάκων από CPU σε GPU A_b, A_0, A, B *και* $\boldsymbol{a_{old}}$

for $t = dt$ **to** t_{max} **με χρονικό βήμα** dt

  Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $\boldsymbol{a_0} = A_0 \boldsymbol{a_{old}}$

  if $t \leq 2dt$ **then**

    Επίλυση παράλληλα στη GPU $A_b \boldsymbol{a_{new}} = \boldsymbol{a_0}$ *με BiCGSTAB*

  else

    Επίλυση παράλληλα στη GPU $A\boldsymbol{a_1} = \boldsymbol{a_0}$ *με BiCGSTAB*

    Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $\tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}} = \boldsymbol{a_0} - dt\sqrt{3}B\boldsymbol{a_1}$

    Επίλυση παράλληλα στη GPU $A\boldsymbol{a_2} = \tilde{\boldsymbol{a}}_{\boldsymbol{0}}$ *με BiCGSTAB*

    Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $\boldsymbol{a_2} = \boldsymbol{a_0} + \frac{dt}{2}B(\boldsymbol{a_1} + \boldsymbol{a_2})$

    Επίλυση παράλληλα στη GPU $A_0 \boldsymbol{a_{new}} = \boldsymbol{a_2}$ *με BiCGSTAB*

  endif

  Υπολογισμός παράλληλα στη GPU $\boldsymbol{a_{old}} = \boldsymbol{a_{new}}$

endfor

Αποστολή από GPU σε CPU του διανύσματος της λύσης $\boldsymbol{a_{new}}$

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Επιλογή αρχικής προσέγγισης $\boldsymbol{x}^{(0)}$ της λύσης $\boldsymbol{x}$

Υπολογισμός σε GPU $r^{(0)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(0)}$

Επιλογή $\hat{r}$ (συνήθως $\hat{r} = r^{(0)}$)

for $i = 1, 2, \ldots$

Υπολογισμός σε GPU $\rho_{i-1} = \hat{r}^T r^{(i-1)}$

if $\rho_{i-1} = 0$ η μέθοδος αποτυγχάνει

if $i = 1$

Υπολογισμός σε GPU $p^{(1)} = r^{(0)}$

else

$\beta_{i-1} = \frac{\rho_{i-1}}{\rho_{i-2}} \frac{\alpha_{i-1}}{\omega_{i-1}}$

Υπολογισμός σε GPU $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1} v^{(i-1)})$

endif

Αποστολή από GPU σε CPU $p^{(i)}$

Επίλυση σε CPU $L\,\boldsymbol{y} = p^{(i)}$

Επίλυση σε CPU $U\,\hat{p} = \boldsymbol{y}$

Αποστολή από CPU σε GPU $\hat{p}$

Υπολογισμός σε GPU $v^{(i)} = A\,\hat{p}$

Υπολογισμός σε GPU $\alpha_i = \frac{\rho_{i-1}}{\hat{r}^T v^{(i)}}$

Υπολογισμός σε GPU $s = r^{(i-1)} - \alpha_i\, v^{(i)}$

if $\| s \|$ είναι αρκετά μικρό **then**

Υπολογισμός σε GPU $\boldsymbol{x}^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i-1)} + \alpha_i\, \hat{p}$ τέλος

Αποστολή από GPU σε CPU s

Επίλυση σε CPU $L\,\boldsymbol{y} = s$

Επίλυση σε CPU $U\,z = \boldsymbol{y}$

Αποστολή από CPU σε GPU z

Υπολογισμός σε GPU $t = A\,z$

Υπολογισμός σε GPU $\omega_i = \frac{s^T t}{t^T t}$

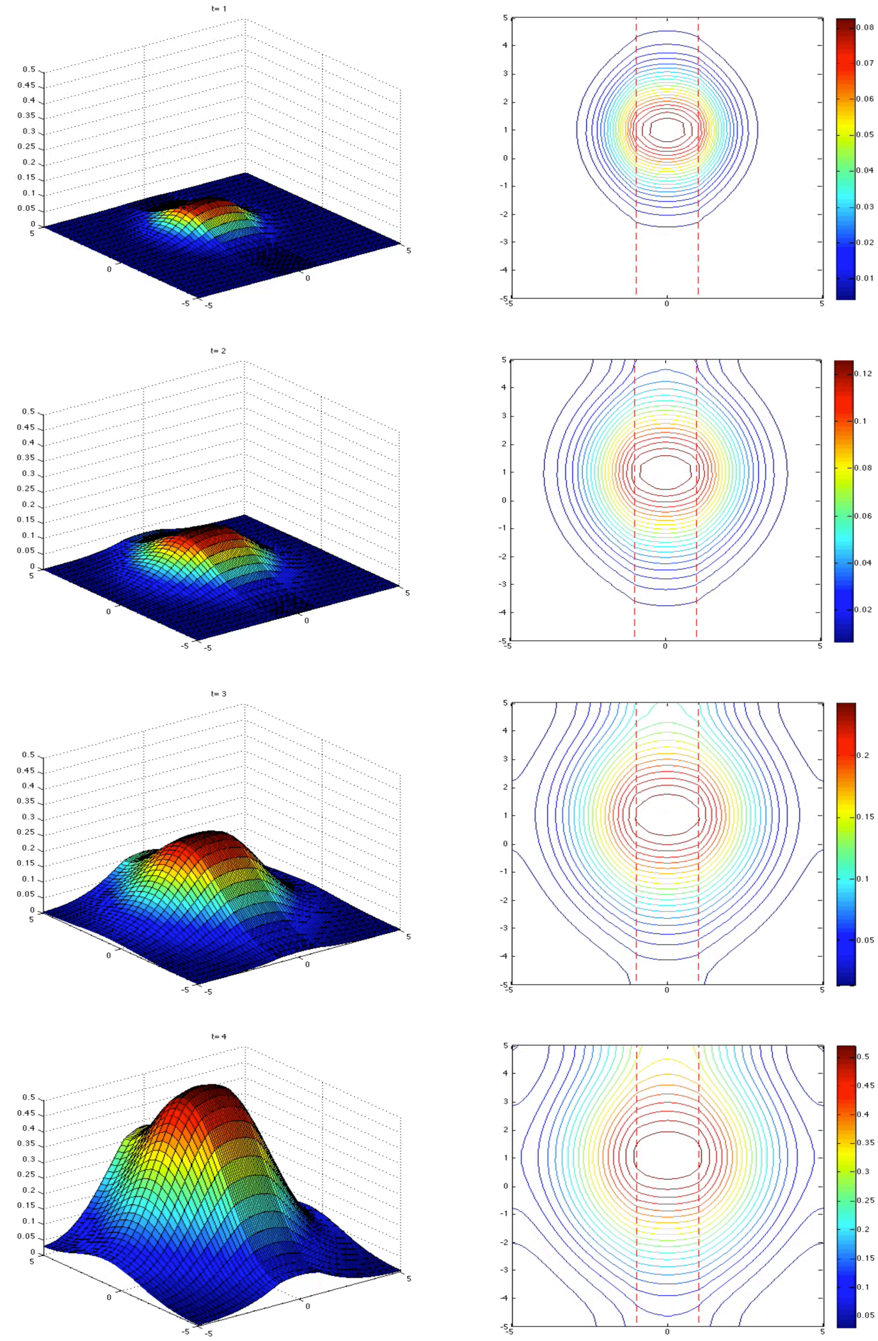
Υπολογισμός σε GPU $\boldsymbol{x}^{(i)} = \boldsymbol{x}^{(i-1)} + \alpha_i\, \hat{p} + \omega_i\, z$

Έλεγχος σύγκλισης

if $\omega_i = 0$ τέλος

Υπολογισμός σε GPU $r^{(i)} = s - \omega_i\, t$

end



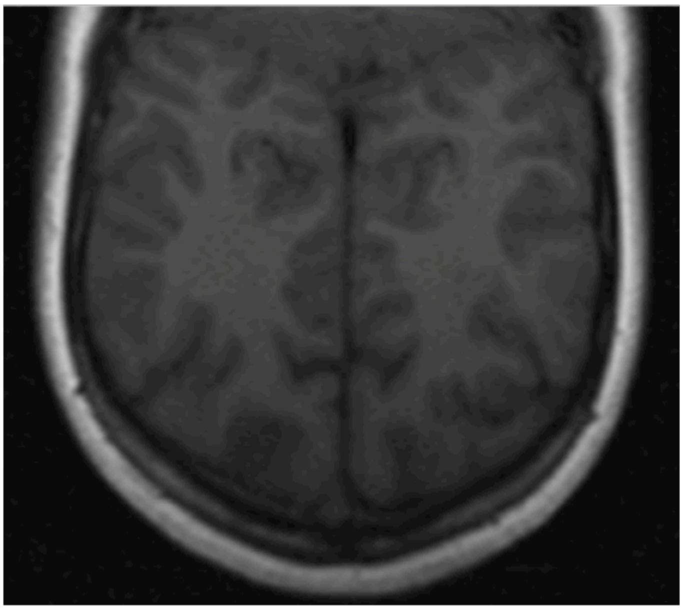
Σχήμα 3: Προσεγγίσεις λύσεων του προβλήματος για το αριθμητικό σχήμα 2D DHC-DIRK στα δεξιά, ενώ στα αριστερά τα ισοϋψή γραφήματα τους για τα χρονικά βήματα $t = 1, 2, 3$ και 4 αντίστοιχα.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.3 Αναγνώριση, Ψηφιοποίηση και Διακριτοποίηση Ετερογενών Περιοχών MRI Απεικόνισης Εγκεφάλου

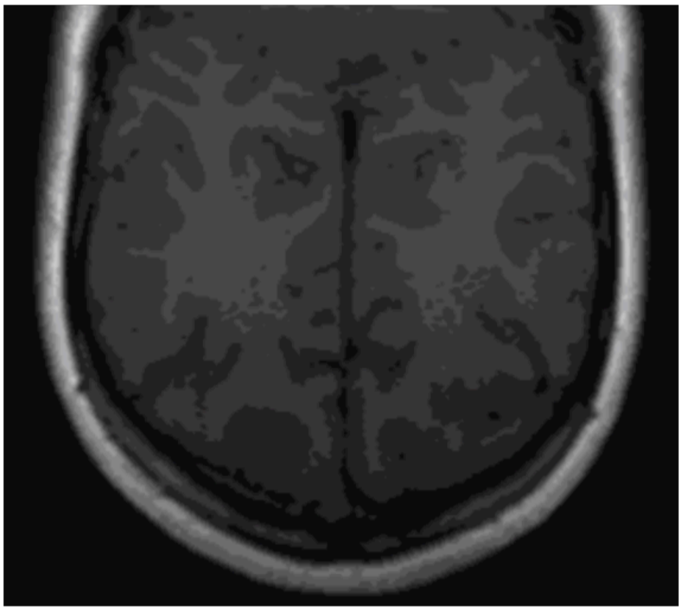
Για την αναγνώριση, ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση ετερογενών περιοχών εγκεφάλου από MRI απεικονίσεις έγινε χρήση σειρά εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού (Matlab, GMSH) προς την τελική εισαγωγή κατάλληλων δεδομένων στην πλατφόρμα λογισμικού FeniCS.

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

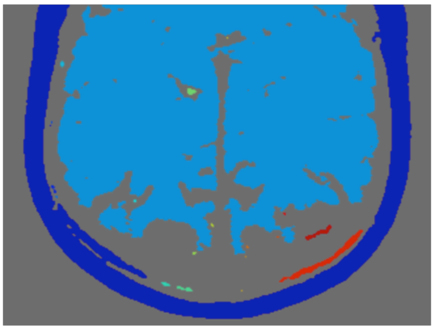


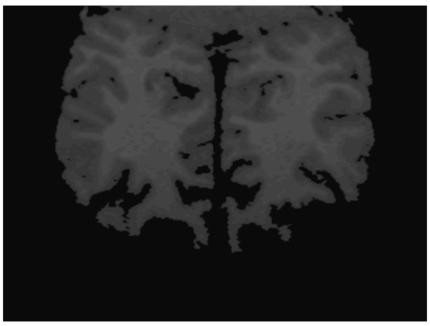
Αρχικά η εικόνα της μαγνητικής τομογραφίας MRI εισάγεται στο λογισμικό MatLab, ώστε να γίνει εφικτός ο διαχωρισμός των διαφορετικών περιοχών του εγκεφάλου. Έτσι κάνοντας χρήση των δυνατοτήτων του Image Processing Toolbox είναι δυνατή η ομαδοποίηση περιοχών της εικόνας σε δέκα αποχρώσεις του γκρι όπως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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



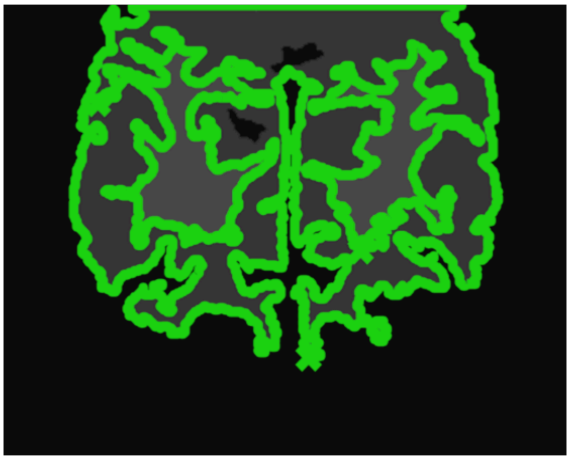
Στη συνέχεια επιλέγονται οι περιοχές ενδιαφέροντος από την εικόνα και ομαδοποιούνται οι περιοχές σε αυτές με τις τρεις πιο κοντινές αποχρώσεις και η εικόνα περνάει από μια διαδικασία φιλτραρίσματος στην οποία διαγράφονται όλες οι περιοχές με χαμηλή συγκέντρωση pixel ενός χρώματος. Η διαδικασία αυτής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



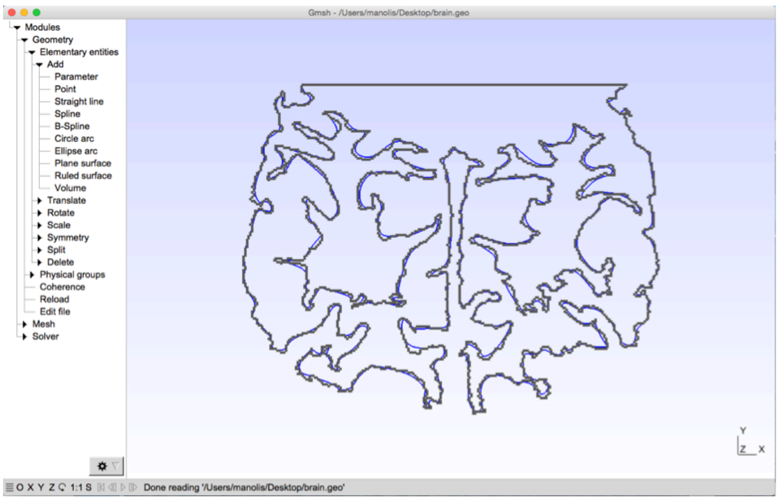



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

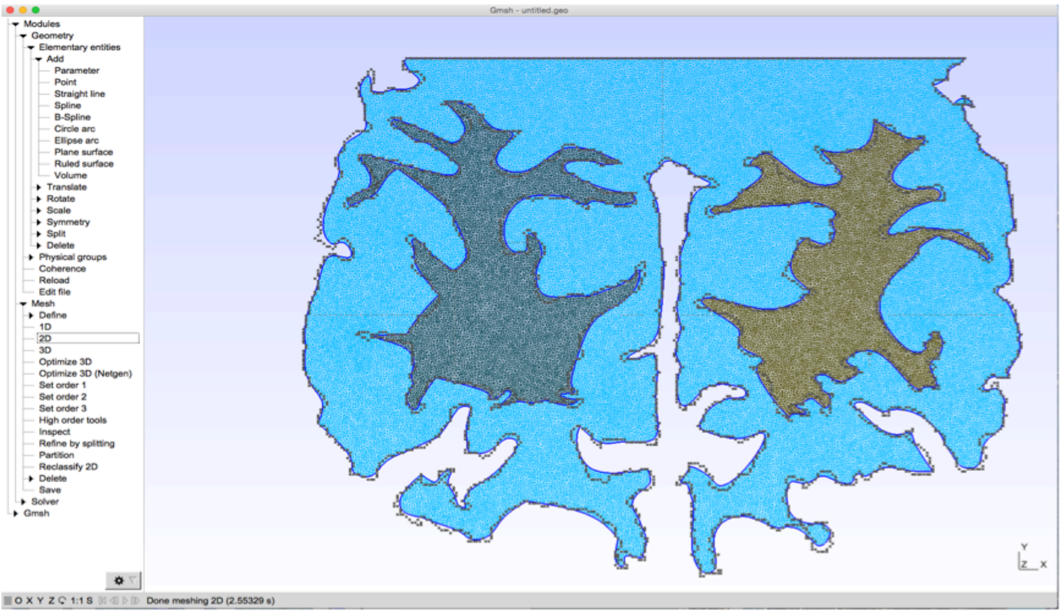


Η εικόνα σε ψηφιακή μορφή που περιγράφει τα όρια των περιοχών του εγκεφάλου εισάγεται στο λογισμικό GMSH, ώστε να οριστούν οι διαφορετικές περιοχές διακριτοποίησης, οι περιοχές ασυνέχειας καθώς και τα σύνορα ορισμού κάθε προβλήματος περιοχής. Μέσω του ίδιου λογισμικού θα γίνει και η διακριτοποίηση των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

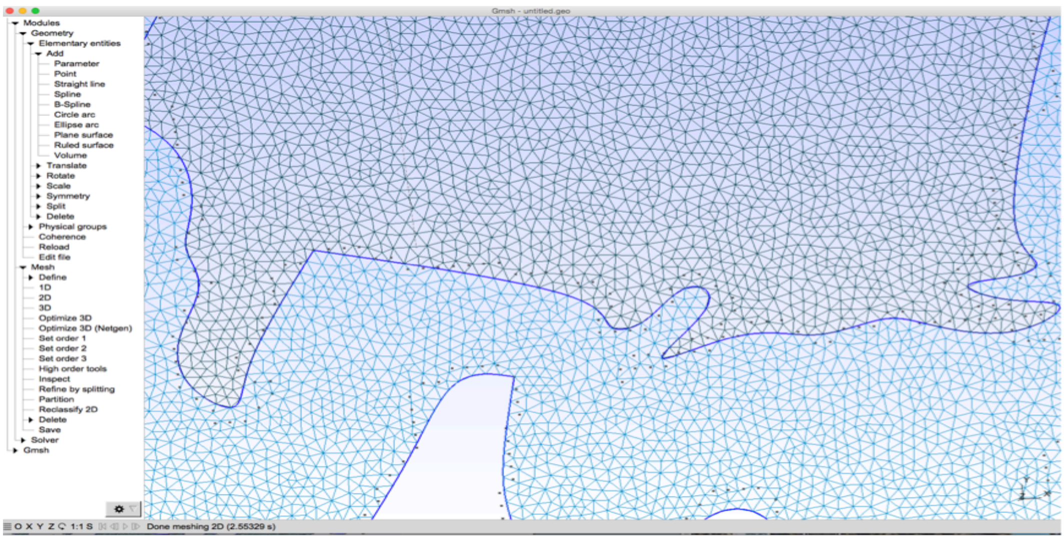


Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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



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



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

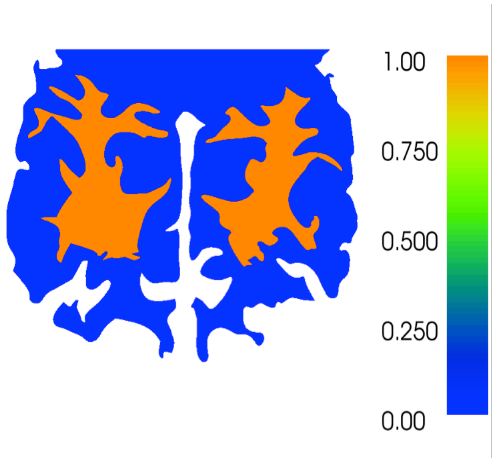
Η συνολική πληροφορία της διακριτοποίησης μαζί με αυτήν των εξωτερικών και εσωτερικών συνόρων κάθε περιοχής ορισμού του προβλήματος εισάγεται στο λογισμικό Fenics με την παραγωγή από το λογισμικό GMSH κατάλληλου αρχείου τύπου .mesh καθώς και τριών αρχείων τύπου xml τα οποία περιέχουν τις πληροφορίες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

MeshTest.py — Edited

MeshTest.py 〉 No Selection

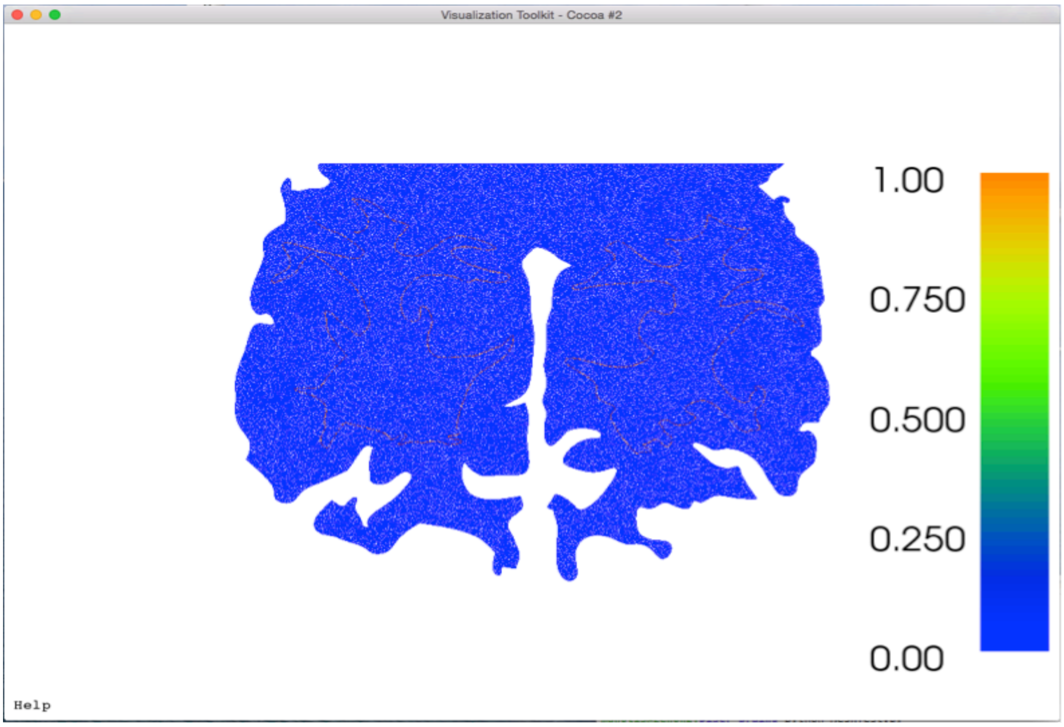
```python
from dolfin import *

# Read mesh from file
r = Mesh("brain.xml")
subdomains=MeshFunction("size_t",r,"brain_physical_region.xml")
boundaries=MeshFunction("size_t",r,"brain_facet_region.xml")

# Show mesh
plot(subdomains)
plot(boundaries)
plot(r)
interactive()
```

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

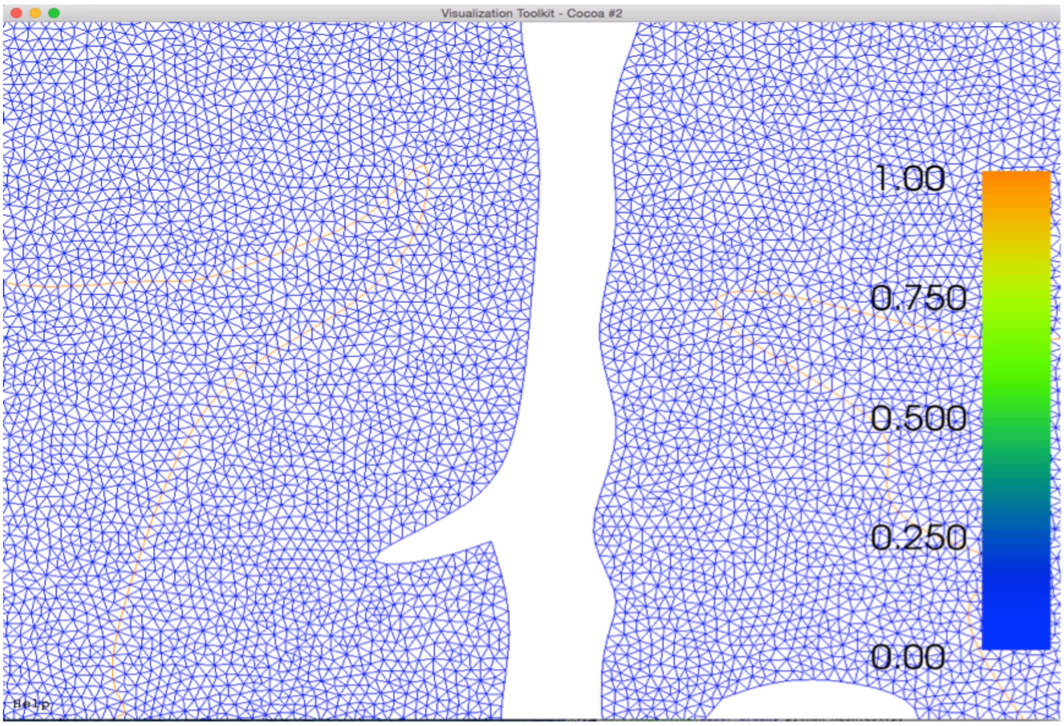


Το επόμενο γράφημα εμφανίζει τα όρια των περιοχών ασυνέχειας.

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



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



3 Αποτελέσματα

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

Θεωρούμε την εξίσωση

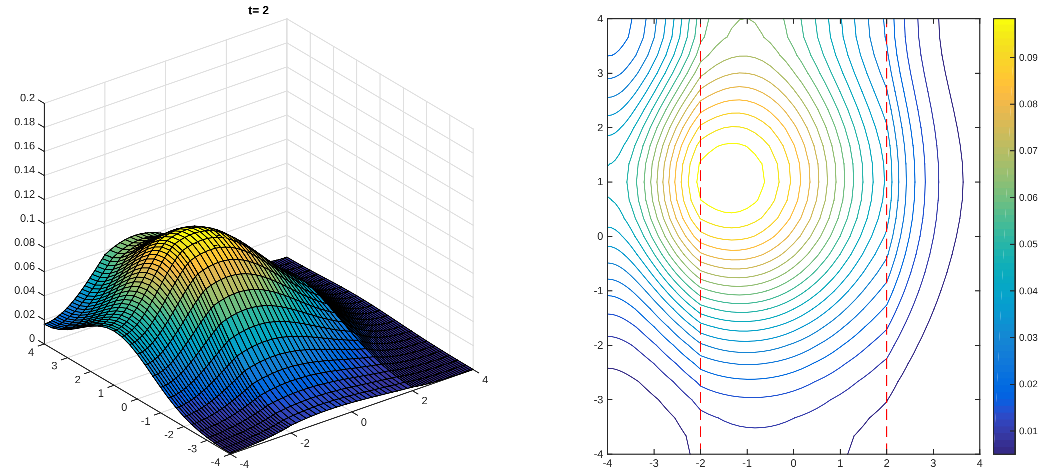
$$\begin{cases} c_t = (Dc_x)_x + (Dc_y)_y + c(1-c) \ , \ (x,y) \in [-4,4]^2 \ , \ t \geq 0 \\ \frac{\partial c}{\partial \eta} = 0 \quad \text{και} \quad c(x,y,0) = f(x) \end{cases} \tag{8}$$

με

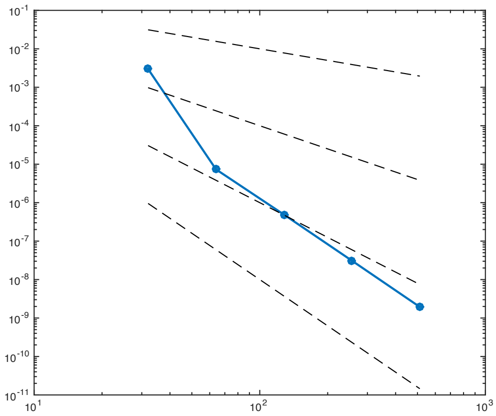
$$D = \begin{cases} \gamma & , \ (x,y) \in [-4,-2) \cup [-4,4] \\ 1 & , \ (x,y) \in [-2,2) \cup [-4,4] \\ \gamma & , \ (x,y) \in [-2,4) \cup [-4,4] \end{cases}$$

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



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



Σχήμα 5: Η τάξη σύγκλισης της μεθόδου dDHC.

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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

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

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

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

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

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

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

4 Παραδοτέα

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

5 Συνεργασίες

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

6 Μελλοντικές Δράσεις

Οι μελλοντικές δράσεις που σχεδιάζουμε περιλαμβάνουν:

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

Αναφορές

[1] Akrivis G *Implicit-Explicit multistep methods for nonlinear parabolic equations*, Mathematics of Computation, **82**, 45-68, 2012

[2] R. Alexander ”Diagonally Implicit Runge-Kutta Methods for stiff ODE’s”, *SIAM Num. Anal.*, vol. 14, no. 6, pp. 1006-1021, 1977.

[3] C. de Boor and B. Swartz ”Collocation at Gaussian points”, *SIAM Num. Anal.*, vol.10, pp. 582-606, 1973.

[4] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr. “The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional 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.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

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

ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[24] Shu CW *Total-variation-diminishing time discretizations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., **9**, 1073-1084, 1988

[25] Shu CW and Osher S *Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes*, J. Comput. Phys., **77**, 439-471, 1988

[26] G.D. Smith "Numerical solution of partial equations:finite difference methods(third edition),"*Oxford University Press*, 1985.

[27] K.R.Swanson "Mathematical modelling of the growth and control of tumour," *PHD Thesis, University of Washington*, 1999.

[28] K.R.Swanson, E.C.Alvord Jr and J.D.Murray "A quantitive model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol.33, pp.317-329, 2000.

[29] K.R.Swanson,C.Bridge,J.D.Murray and E.C.Alvord Jr " Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci*, vol.216, pp.1-10, 2003.

[30] P.Tracqui,G.C.CruywagenG,D.E.Woodward,T.Bartoo, J.D.Murray and E.C.Alvord Jr. "A mathematical model of glioma growth:The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth," *Cell Proliferation*, vol.28, pp.17-31, 1995.

[31] D.E.Woodward,J.Cook,P.Tracqui,G.C.Cruywagen,J.D.Murray,and E.C.Alvord Jr."A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection," *Cell Proliferation*, vol.29, pp.269-288, 1996.

[32] H. der Vorst, Bi-CGSTAB, *A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci.Stat.Comp., 13: 631-644, 1992.

[33] R. Varga, *Matrix Iterative Analysis*, New York: Springer Verlag, 2000.

[34] Chandra Rohit, *Parallel programming with OpenMP*, M.K., 2001.

[35] *http://www.fenicsproject.org*.

[36] *http://geuz.org/gmsh/*.

[37] *http://www.mathworks.com*.

[38] *http://www.nvidia.com/object/tesla-servers.html*.

[39] *http://www.pgroup.com*.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[40] *http://www.netlib.org*.

[41] *http://www.openmp.org*.

[42] *http://www.openacc.org*.

[43] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*, SIAM, 2003.

[44] J. Dongarra and I. Duff and D. Sorensen and H. van der Vorst, *Numerical Linear Algebra for high-performance computers*, SIAM, 1998.

[45] C.E. Houstis, E.N. Houstis, and J. Rice, *Pde computations: Methods and performance evaluation*, Par. Comp., 5: 141-163, 1997.

[46] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Iterative solution of elliptic collocation systems on a cognitive parallel computer*, Computers and Maths with Appl., 48: 951-970, 2004.

[47] E.N. Marhioudakis, E. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Mapping parallel iterative algorithms for pde computations on a distributed memory computers*, Parallel Algorithms and Applications, 8: 141-154, 1996.

[48] E.N. Marhioudakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, *Bi-CGSTAB for collocation equations on distributed memory parallel computers*, Numerical Mathematics and advanced applications - ENUMATH 2001, Springer, 957-966, 2003.

[49] E. Mathioudakis and E. Papadopoulou, *Grid computing for the bi-cgstab applied to the solution of the modified helmholtz equation*, Int. J. App. Maths and comp. sciences, (4) 3: 179-184, 2007.

[50] T. Papatheodorou, *Block aor iteration for nonsymmetric matrices*, Math. Comp., (41) 164: 511-525, 1983.

[51] E. Mathioudakis, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, *Preconditioning for solving hermite collocation by the bi-cgstab*, WSEAS Trans. on Mathematics, (5) 7: 811-816, 2006.

[52] C.C.Christara, *Parallel solvers for spline collocation equations*, Advances in Engineering Software, 27: 71-89, 1996.

[53] S.H.Brill and G.F.Pinder, *Parallel implementation of the bi-cgstab method with block red-black gauss-seidel preconditioner applied to the hermite collocation discretization of partial differetial equations*, Parallel Computing, 28: 399-414, 2002.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Παράρτημα Θ΄ Ετήσια Τεχνική Έκθεση Δράσης 4.3

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ετήσια Τεχνική Έκθεση

Έτος 2014

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

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Περιεχόμενα

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

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 αναπτύσσεται και μελετάται με επιτυχία μία νέα μορφή του στοχαστικού αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX καθώς και ενός πλήρους συστήματος κυρώσεων για την επιβολή των περιοριστικών συνθηκών του προβλήματος. Η μελέτη της συμπεριφοράς του επιτυγχάνεται 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. Μελετάμε και αναλύουμε πλήρως τη συμπεριφορά του του νέου αλγορίθμου τόσο στην παραγωγή βέλτιστων αντλήσεων από τις ενεργές γεωτρήσεις ενός υδροφορέα όσο και την ευαισθησία των παραγωμένων λύσεων στην προστασία των γεωτρήσεων από το φαινόμενο της υφαλμύρινσης.

Παράλληλα επιτυγχάνεται η ψηφιοποίηση και η διακριτοποίηση του πεδίου, που αναφέρεται στον υπόγειο υδροφορέα της Χερσονήσου Ηρακλείου, καθώς και η επιτυχής εισαγωγή του προς χρήση από την πλατφόρμα λογισμικού FEniCS.

1.1 Βελτιστοποίηση διαδικασίας αντλήσεων σε παράκτιους υδροφορείς

Οι ερευνητικοί στόχοι της τρέχουσας περιόδου 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.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Η συμπεριφορά και η αποδοτικότητα της νέας αυτής διαδικασίας βελτιστοποίησης διερευνώνται διεξοδικά μέσα από την εξέταση ενός πλήθους σεναρίων άντλησης και καιρικών συνθηκών, σε έναν υδροφορέα ορθογώνιας γεωμετρίας που προσομοιώνει έναν πραγματικό υδροφόρο ορίζοντα στην περιοχή Βαθύ Καλύμνου.

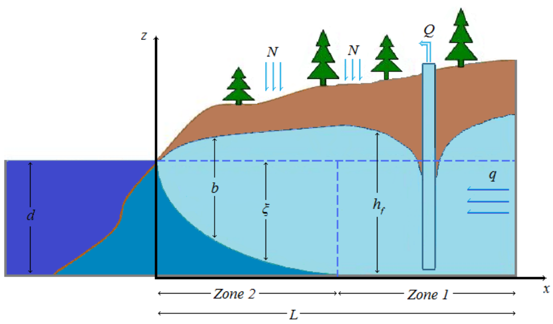
1.2 Χρήση λογισμικού FEniCS για την επικύρωση αποτελεσμάτων αριθμητικών μεθόδων

Με στόχο τη χρήση της πλατφόρμας λογισμικού FEniCS [23] για την επικύρωση των αποτελεσμάτων μας όσον αφορά το πρόβλημα της υφαλμύρισης υπόγειων παράκτιων υδροφορέων και ειδικότερα αυτού της περιοχής της Χερσονήσου Ηρακλείου, προχωρήσαμε στην ανάπτυξη αλγορίθμων και χρήση των εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού για την ψηφιοποίηση και διακριτοποίηση του υπόγειου υδροφορέα Χερσονήσου.

2 Μεθοδολογία

2.1 Βελτιστοποίηση διαδικασίας αντλήσεων σε παράκτιους υδροφορείς

Το σύνθετο πρόβλημα της εισβολής αλμυρού νερού σε υπόγειους παράκτιους υδροφορείς καθώς και η μαθηματική περιγραφή απλοποιημένων μοντέλων που βασίζονται στην προσέγγιση Sharp Interface και στην εξίσωση των Ghyben-Herzberg (βλ. Σχ. 1), έχουν περιγραφή αναλυτικά στην ΤΕ 2012.



Σχήμα 1: Παράκτιος υδροφορέας γλυκού νερού. Παράμετροι μοντελοποίησης.

Υπενθυμίζουμε ότι η βασική ΜΔΕ δυναμικού ροής του Strack γράφεται ως

$$\frac{\partial}{\partial x}(K\frac{\partial \phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K\frac{\partial \phi}{\partial y}) + N - Q = 0 \ , \qquad (1)$$

η οποία στη περίπτωση ομογενών ορθογώνιων υδροφορέων επιδέχεται την αναλυτική λύση [2]:

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

όπου

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

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

2.1.1 Διαδικασία στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX

Το πρόβλημα βελτιστοποίησης της διαδικασίας αντλήσεων, με την νέα εκθετικής μορφής συνάρτησης κόστους, λαμβάνει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{array}{ll} \text{max:} & P \equiv P(\boldsymbol{Q}) = e^{-\left[S(\overline{\boldsymbol{Q}}) - S(\boldsymbol{Q})\right]^2 / S^2(\overline{\boldsymbol{Q}})} \in [0,1] \\ \text{s.t.:} & 0 \leq \underline{Q_i} \leq Q_i \leq \overline{Q_i} < Q_A \\ & S(\boldsymbol{Q}) = \sum_{i=1}^{M} Q_i \leq Q_A \\ & x_{\tau,i} \leq x_i - d_s, \ i = 1, \ldots, M \end{array} \qquad (4)$$

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

Ο νέος τροποποιημένος αλγόριθμος στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX V επιτρέπει διαφορετικές τιμές των ελεύθερων παραμέτρων του αλγορίθμου σε κάθε επανάληψη και έχει τη μορφή :

$$\boldsymbol{Q}^{(k)} = \boldsymbol{Q}^{(k-1)} + c_k \Delta P^{(k-1)} \Delta \boldsymbol{Q}^{(k-1)} + \boldsymbol{g}^{(k)} \ , \quad k = 2, 3, \ldots \qquad (5)$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

όπου

$$\begin{aligned} \Delta \boldsymbol{Q}^{(k)} &= \boldsymbol{Q}^{(k)} - \boldsymbol{Q}^{(k-1)} \\ \Delta P^{(k)} &= P(\boldsymbol{Q}^{(k)}) - P(\boldsymbol{Q}^{(k-1)}) \end{aligned} \tag{6}$$

για δεδομένες αρχικές τιμές των μεταβλητών ελέγχου $\boldsymbol{Q}^{(k)}$, με $k = 0, 1$. Η πραγματική παράμετρος c_k ελέγχου το πλάτος του όρου feedback, ενώ η $\boldsymbol{g}^{(k)}$ ελέγχει το πλάτος του όρου noise. Αποδείξαμε δε ότι για τις τιμές των παραμέτρων:

$$c_k = \frac{1}{|\Delta P^{(k-1)}|} \tag{7}$$

and

$$g_j^{(k)} = \gamma Q_j^{(k-1)} \mathcal{X}_j^{(k)} \ , \quad j = 1, \cdots, M \tag{8}$$

όπου το γ αναφέρεται σε ένα μικρό ποσοστό 1% – 2% των $Q_j^{(k-1)}$, ενώ η $\mathcal{X}_j^{(k)}$ είναι μια τυχαία μεταβλητή με τιμές ομοιόμορφα κατανεμημένες στο διάστημα $(-0.5\ ,\ 1)$ η μέθοδος επιτυγχάνει γρηγορότερη σύγκλιση στα πλαίσια βέβαια του πλάτους του θορύβου.

ALOPEX βελτιστοποίηση με χρήση περιορισμών

Σε κάθε επαναληπτικό βήμα του ALOPEX, μία κατάλληλα επιλεγμένη στρατηγική εφαρμογής κυρώσεων λαμβάνει χώρα, έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η καθοδήγηση της όλης διαδικασίας προς την κατεύθυνση όπου μεγιστοποιείται η χρησιμοποιούμενη αντικειμενική συνάρτηση, λαμβάνοντας υπόψη τους σχετικούς φυσικούς περιορισμούς του προβλήματος. Πιο συγκεκριμένα, βλέπουμε τα παρακάτω:

Σε κάθε επανάληψη του ALOPEX μεταβάλλονται οι τιμές όλων των μεταβλητών ελέγχου $Q_i,\ i = 1, \ldots, M$, χρησιμοποιώντας ένα σύστημα κυρώσεων ελέγχου 2 φάσεων, με τα εξής χαρακτηριστικά:

- Και στις δύο φάσεις εφαρμογής των κυρώσεων ελέγχου, οι τιμές εκείνων των Q_i οι οποίες χρειάζονται μεταβολή, μεταβάλλονται κατά ένα ποσοστό, όπου για τη συγκεκριμένη αναφορά ισούται με 5%. Αυτή είναι μια 5% πολιτική, εφαρμοζόμενη μέσω της παραμέτρου $\delta = 0.05$.

- Στην πρώτη φάση, αρχικά, εάν η παρούσα άντληση $Q_i^{(k)}$ της i^{th} γεώτρησης, προτεινόμενη από τον ALOPEX, παραβιάζει τη μέγιστη ή την ελάχιστη δυνατή τιμή, δηλαδή $Q_i^{(k)} > \overline{Q}_i$ or $Q_i^{(k)} < \underline{Q}_i$, η τιμή της $Q_i^{(k)}$ τροποποιείται ως εξής:

  $$Q_i^{(k)} = (1-\delta)\overline{Q}_i \text{ or } Q_i^{(k)} = (1+\delta)\underline{Q}_i \tag{9}$$

  για $i = 1, \ldots, M$.

  Παραμένοντας στην πρώτη φάση, ορίζουμε τα αθροίσματα

  $$\begin{aligned} S_{i-1}^{(k)} &:= \textstyle\sum_{j=1}^{i-1} Q_j^{(k)} + \sum_{j=i}^{M} Q_j^{(k-1)} \\ \tilde{S} &:= S_{i-1}^{(k)} + \Delta Q_i^{(k)} - \overline{Q}_A \end{aligned} \tag{10}$$

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

με $S_0^{(k)} = S(Q_1^{(k-1)}, \cdots, Q_M^{(k-1)})$, ενώ ο έλεγχος του συνολικού μεγίστου ακολουθεί. Έτσι, στην περίπτωση αυτή, εάν $\tilde{S} > 0$, η τιμή της $Q_i^{(k)}$ τροποποιείται ως εξής:

$$Q_i^{(k)} = Q_i^{(k)} - (1+\delta)\tilde{S} \tag{11}$$

για $i = 1, \ldots, M$.

- Στη δεύτερη φάση, η εφαρμογή του περιορισμού προσέγγισης επιτυγχάνεται σε δύο κύκλους. Στον πρώτο, μόνο οι τιμές άντλησης των ενεργών γεωτρήσεων σε κίνδυνο, δηλαδή $x_{\tau,i} > x_i - d_s$, τροποποιούνται, σύμφωνα με την εξίσωση:

  $$Q_i^{(k)} = (1-\delta)Q_i^{(k)}, \tag{12}$$

  για $i = 1, \ldots, M$.
  Έπειτα, στο δεύτερο κύκλο, εάν οι τοπικές διορθώσεις αντλήσεων δεν κατάφεραν να περιορίσουν την επέλαση του υφάλμυρου μετώπου, εφαρμόζεται μία γενικευμένη τροποποίηση (βλέπε (12)) στις τιμές των αντλήσεων για όλες τις γεωτρήσεις.

ALOPEX βελτιστοποίηση: Κριτήριο Τερματισμού
Με στόχο τη δημιουργία ενός αποτελεσματικού κριτηρίου ολοκλήρωσης της διαδικασίας βελτιστοποίησης, χρησιμοποιούμε έναν συνδυασμό της τυπικής απόκλισης $\sigma_{\hat{k}}$ της αντικειμενικής συνάρτησης στις τελευταίες $\hat{k}$ επαναλήψεις (στην παρούσα αναφορά ορίζεται ότι $\hat{k} = 20$) και της διαφοράς των μέσων τιμών $\mu_{\hat{k}}$ της αντικειμενικής συνάρτησης στο διάστημα των τελευταίων $2\hat{k}$ επαναλήψεων. Ορίζουμε τη χρησιμοποιούμενες μέση τιμή $\mu_{\hat{k}}$ και τυπική απόκλιση $\sigma_{\hat{k}}$ ως εξής:

$$\begin{aligned} \mu_{\hat{k}} &= \tfrac{1}{\hat{k}} \textstyle\sum_{i=k-\hat{k}}^{k} P(\boldsymbol{Q}^{(i)}) \\ \sigma_{\hat{k}} &= \sqrt{\tfrac{1}{\hat{k}} \textstyle\sum_{i=k-\hat{k}}^{k} (P(\boldsymbol{Q}^{(i)}) - \mu_{\hat{k}})^2} \end{aligned} \tag{13}$$

όπου k είναι η τρέχουσα επανάληψη, με $k - 2\hat{k} > 0$. Τότε, η πραγματοποίηση του παρακάτω κριτηρίου:

$$(\sigma_{\hat{k}} < \epsilon_1) \wedge (\mid \mu_{\hat{k}} - \mu_{2\hat{k}} \mid < \epsilon_2) \tag{14}$$

για θετικές μικρές ανοχές ϵ_1 και ϵ_2 (στην παρούσα αναφορά και οι δύο ορίζονται να είναι ίσες με 10^{-2}), θεωρώντας επίσης ότι όλοι οι περιορισμοί ικανοποιούνται, τερματίζει τη διαδικασία βελτιστοποίησης.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

2.1.2 Αριθμητικές προσομοιώσεις - Αποτελέσματα

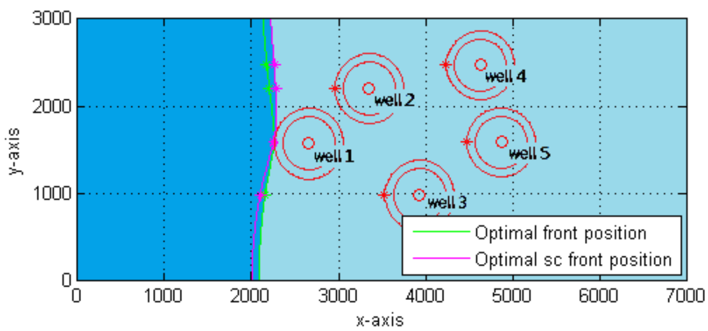
Ανάμεσα στο μεγάλο αριθμό προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν για την επικύρωση της στοχαστικής διαδικασίας διαχείρισης αντλήσεων που περιγράφεται στις προηγούμενες παραγράφους, στην ενότητα αυτή επιλέξαμε προς παρουσίαση μία από αυτές, θεωρώντας ότι απεικονίζει καλύτερα τα ποιοτικά χαρακτηριστικά της διαδικασίας. Τα χαρακτηριστικά μεγέθη που προσομοιώνουν τον υπόγειο υδροφορέα στο Βαθύ Καλύμνου περιλαμβάνονται στον Πίνακα 1 που ακολουθεί.

Πίνακας 1: Χαρακτηριστικά υδροφορέα Καλύμνου.

Aquifer characteristics	*Well characteristics*
$L = 7000m$	$r_c = 300m$
$W = 3000m$	$d_s = 100m$
$K = 100m/day$	$\overline{Q}_A = 15000m^3/day$
$q = 1.23m^2/day$	$\overline{Q}_j = 2500m^3/day, \quad j = 1, \dots, M$
$d = 25m$	$\underline{Q}_j = 200m^3/day, \quad j = 1, \dots, M$
$N = 30mm/year$	M: *number of aquifer wells.*

Ο υδροφορέας διαθέτει 5 ενεργές γεωτρήσεις τοποθετημένες στις συντεταγμένες $(x_1, y_1) = (2657, 1572)$, $(x_2, y_2) = (3353, 2200)$, $(x_3, y_3) = (3932, 975)$, $(x_4, y_4) = (4632, 2470)$ και $(x_5, y_5) = (4873, 1586)$. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τις γραφικές παραστάσεις των αποτελεσμάτων ενός τυπικού ελέγχου 500 επαναλήψεων του ALOPEX, αλλά και τα αντίστοιχα αριθμητικά δεδομένα που τις τεκμηριώνουν.

Χρησιμοποιώντας τις τιμές των ολικά βέλτιστων λύσεων, η τιμή του μετώπου της

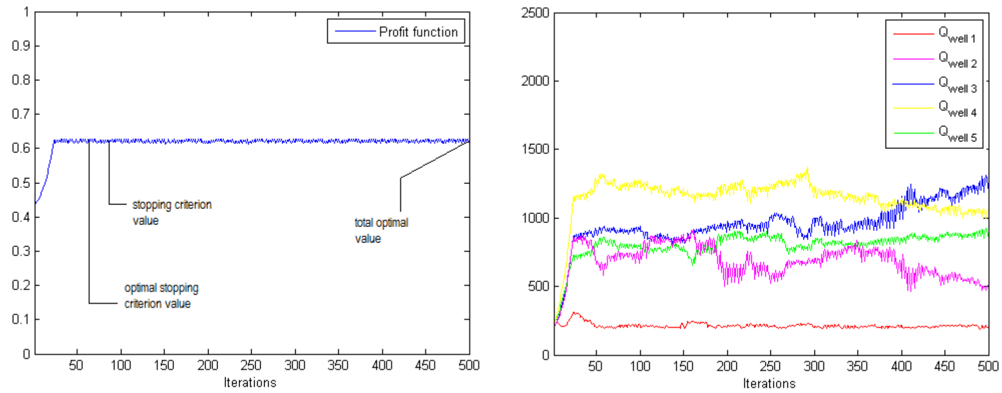


Σχήμα 2: Βέλτιστη θέση του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας.

υφάλμυρης σφήνας βρίσκεται σε μήκος $2260m$ στο εσωτερικό του υδροφορέα.

Μελετώντας το Σχήμα 3α΄, παρατηρούμε ότι ο ALOPEX οδηγεί την αντικειμενική συνάρτηση $P(\boldsymbol{Q})$ λαμβάνοντας υπόψη τους σχετικούς περιορισμούς, κοντά

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



(α΄) Objective function $P(\boldsymbol{Q})$ vs iterations. (β΄) Well pumping rates Q_j vs iterations.

Σχήμα 3: Αντικειμενική συνάρτηση και αντλήσεις των ενεργών γεωτρήσεων στον υδροφορέα της Καλύμνου.

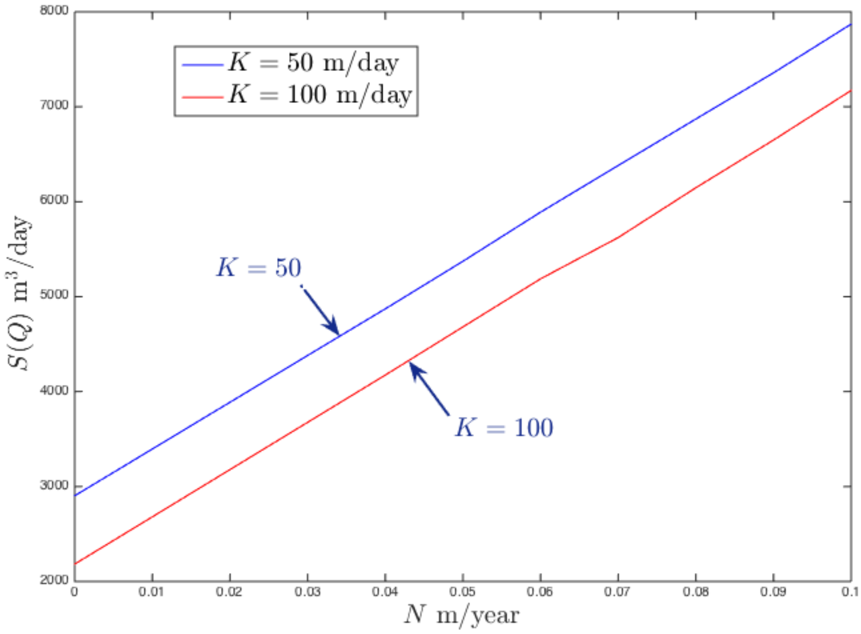
στη μέγιστη τιμή της έπειτα από λίγες σχετικά επαναλήψεις. Επιπλέον, παρατηρώντας τις στήλες 3 και 5 του πίνακα 2, είναι σαφές ότι η βέλτιστη συνολική ικανότητα άντλησης $S(\boldsymbol{Q})$ διαφέρει από τη βέλτιστη τιμή των $S(\boldsymbol{Q})$ μετά την εφαρμογή του κριτηρίου τερματισμού μόνο σε κυβικά μέτρα.

Πίνακας 2: Αριθμητικά αποτελέσματα στοχαστικού αλγορίθμου ALOPEX

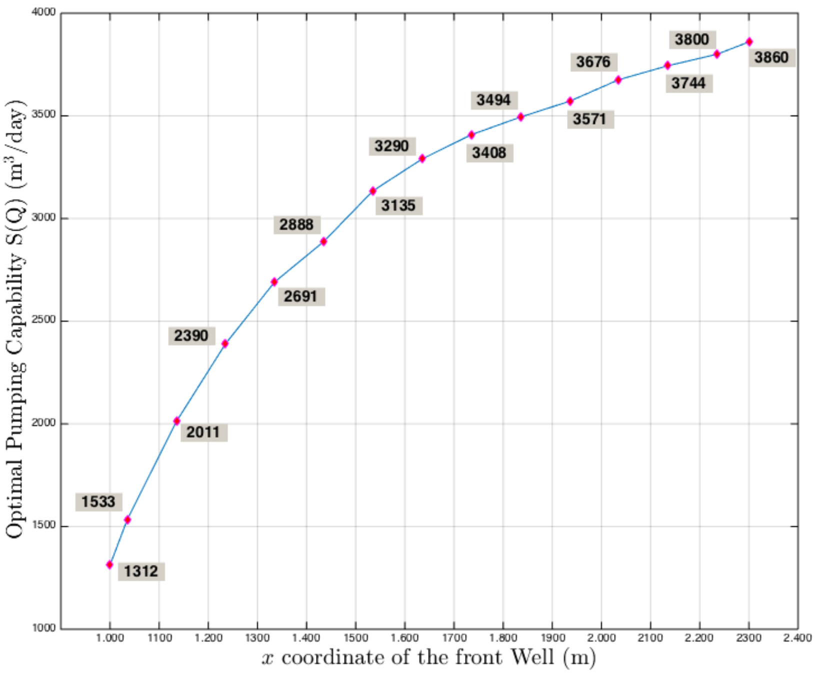
ALOPEX Performance	*Terminal Values*	*Total Optimal Values*	*Stopping Criterion (SC) Values*	*SC Optimal Values*
k *(# iter.)*	500	500	84	63
$P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	0.62769	0.62769	0.62467	0.62753
$Q_1^{(k)}$	202.27	202.27	214.30	206.41
$Q_2^{(k)}$	504.38	504.38	739.03	720.10
$Q_3^{(k)}$	1303.05	1303.05	911.41	923.57
$Q_4^{(k)}$	1047.07	1047.07	1254.90	1278.27
$Q_5^{(k)}$	912.85	912.85	805.97	838.96
$S(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	3969.62	3969.62	3925.60	3967.30
Time in secs	7.87		1.32	

Επίσης, με στόχο την περαιτέρω μελέτη της εξάρτησης των παραπάνω αποτελεσμάτων από τις τιμές των παραμέτρων της υδραυλικής αγωγιμότητας K και του ρυθμού ανατροφοδότησης N του υδροφορέα, παρουσιάζουμε το Σχήμα 4 και τον Πίνακα 3.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



Σχήμα 4: Εξάρτηση βέλτιστων αντλήσεων $S(\boldsymbol{Q})$ από τις παραμέτρους K και N.



Σχήμα 5: Εξάρτηση βέλτιστων αντλήσεων με την απόσταση της γεώτρησης No 1 από την ακτογραμμή.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

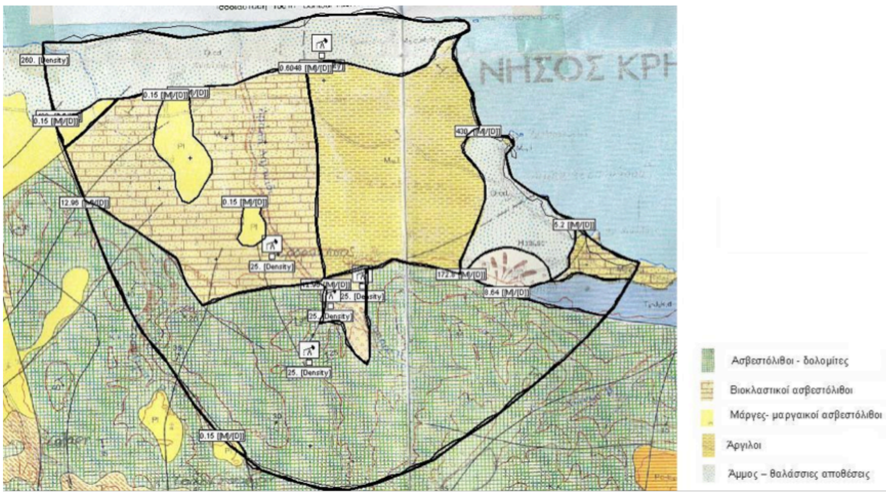
Πίνακας 3: Εξάρτηση απόδοσης του ALOPEX από τις παραμέτρους K και N.

ALOPEX Performance	$K = 50$		$K = 100$	
	$S(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	$P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	$S(\boldsymbol{Q}^{(k)})$	$P(\boldsymbol{Q}^{(k)})$
$N = 0.00$	2902.60	0.44892	2183.10	0.42703
$N = 0.03$	4380.58	0.49323	3676.21	0.47213
$N = 0.04$	4871.44	0.50809	4173.95	0.48701
$N = 0.05$	5372.87	0.52340	4681.34	0.50232
$N = 0.06$	5890.08	0.53929	5187.68	0.51773
$N = 0.07$	6381.39	0.55447	5622.61	0.53106
$N = 0.08$	6871.31	0.56967	6147.20	0.54722
$N = 0.09$	7357.62	0.58480	6649.46	0.56278
$N = 0.10$	7871.11	0.60081	7172.13	0.57902

2.2 Χρήση λογισμικού FEniCS για την επικύρωση αποτελεσμάτων αριθμητικών μεθόδων

Με στόχο τη χρήση της πλατφόρμας λογισμικού FEniCS, το οποίο υλοποιεί αριθμητικές μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων για την επίλυση των ΜΔΕ, για την επικύρωση μεθόδων και λογισμικού στο πρόβλημα εισβολής θαλασσινού ύδατος σε υπόγειους παράκτιους υδροφορείς γλυκών υδάτων, ψηφιοποιήθηκαν πραγματικά δεδομένα πεδίου που αφορούν στον υπόγειο υδροφορέα Χερσονήσου Ηρακλείου Κρήτης.

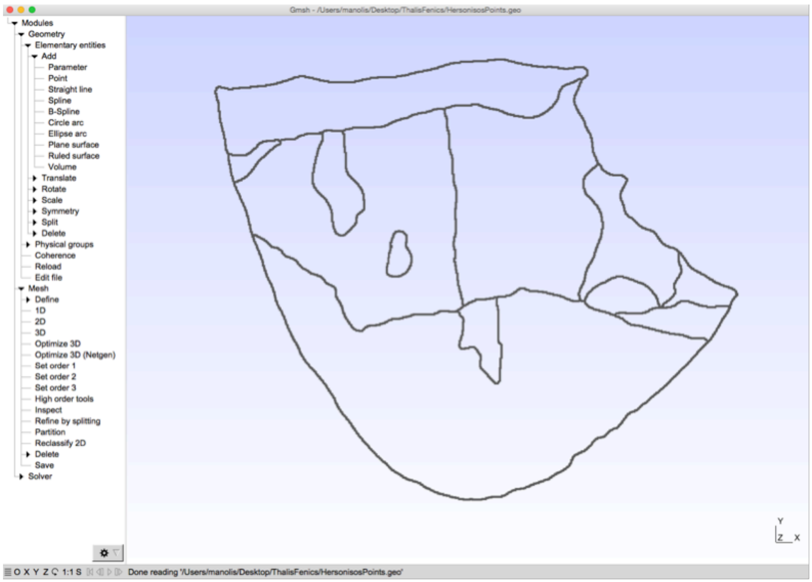
Για την συνοπτική περιγραφή της διαδικασίας παραθέτουμε κατ' αρχήν τον γεωλογικό χάρτη της περιοχής ενδιαφέροντος (βλέπε Σχήμα 6), όπου η θαλάσσια περιοχή βρίσκεται στο βόρειο και ανατολικό (άνω και δεξιό) τμήμα του.



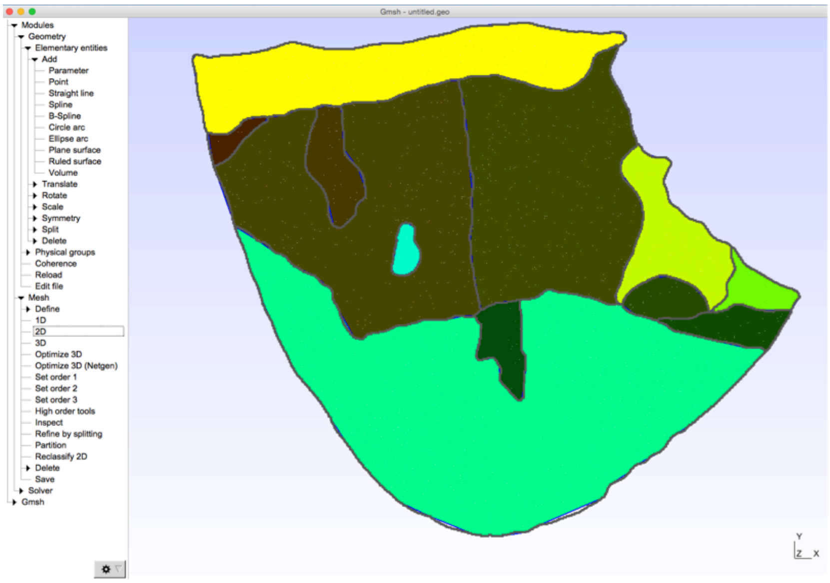
Σχήμα 6: Γεωλογικός χάρτης υδροφορέα της περιοχής Χερσονήσου

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Ακολουθώντας μια διαδικασία παραπλήσια με αυτήν που περιγράφεται στη Δράση 4.2 με τη χρήση του Image Processing Toolbox του λογισμικού MatLab έγινε εφικτή η εισαγωγή στο λογισμικό GMSH των ορίων των περιοχών με ασυνέχειες. Στο Σχήμα 7 εμφανίζονται τα όρια διεπαφής των περιοχών ασυνέχειας, οι συντεταγμένες των οποίων δημιουργήθηκαν ψηφιακά από το λογισμικό MatLab και έχουν εισαχθεί κατάλληλα στο λογισμικό διακριτοποίησης GMSH.



Σχήμα 7: Ορισμός γεωλογικών περιοχών υδροφορέα Χερσονήσου

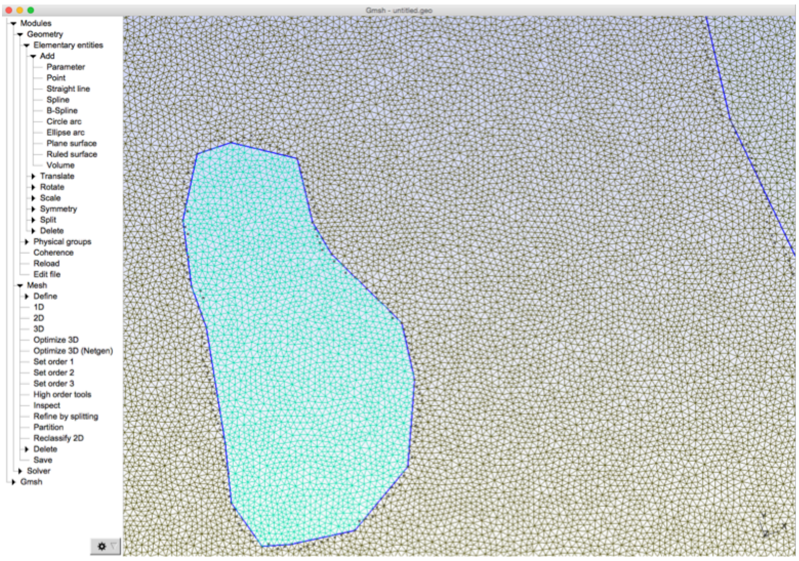


Σχήμα 8: Διακριτοποίηση γεωλογικών περιοχών υδροφορέα Χερσονήσου

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Επιλέγοντας τη χρήση splines έγινε δυνατός ο καθορισμός των συνόρων διεπαφής διαφορετικών περιοχών και, στη συνέχεια, η διακριτοποίηση τους. Στο Σχήμα 8 απεικονίζεται με διαφορετικό χρώμα η διακριτοποίηση κάθε περιοχής του συνολικού προβλήματος, ανάλογα με τα γεωλογικά χαρακτηριστικά (υδραυλική αγωγιγόμητα) του υδροφορέα.

Στο Σχήμα 9 που ακολουθεί παρουσιάζουμε με λεπτομέρεια τη διακριτοποίηση με χρήση τριγωνικών πεπερασμένων στοιχείων σε ένα τμήμα του πεδίου.



Σχήμα 9: Λεπτομέρεια διακριτοποίησης υποπεριοχών υδροφορέα Χερσονήσου

Το πρόβλημα δοκιμών υφαλμύρισης του υδροφορέα Χερσονήσου έχει πλέον εισαχθεί με επιτυχία ψηφιακά στο λογισμικό FEniCS κι έτσι είναι εφικτή η επίλυση του με τη χρήση της αριθμητικής μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων.

3 Μελλοντικές Δράσεις

Τα ερευνητικά αποτελέσματα της τρέχουσας περιόδου οδηγούν στους εξής στόχους για το επόμενο διάστημα:

- Σύζευξη του νέου αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX με πλατφόρμες λογισμικού PTC και FEniCS για την επικύρωση των αποτελεσμάτων σε προβλήματα που περιλαμβάνουν ετερογενείς υπόγειους υδροφορείς με γενικευμένη γεωμετρία πεδίου (Βαθύ Καλύμνου και Χερσονήσου Ηρακλείου Κρήτης).

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Σύζευξη του νέου αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX με την μέθοδο dDHC, που αναπτύξαμε στα πλαίσια της Δράσης 2.1, για ετερογενείς ορθογώνιους υδροφορείς.
- Σύζευξη του νέου αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX με μεθόδους χαλάρωσης στις διεπαφές καθώς και υβριδικές μεθόδους, που αναπτύξαμε στα πλαίσια της Δράσης 2.2, 2.3 και 4.1, μέσω της πλατφόρμας λογισμικού FEniCS.
- Υβριδική εφαρμογή του νέου αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX με παράλληλες διαδικασίες που αναπτύχθηκαν στα πλαίσια της Δράσης 3.1.

4 Παραδοτέα

- Τα αποτελέσματα της παρούσας έρευνας παρουσιάστηκαν στο συνέδριο *NumAn2014, Conference in Numerical Analysis. Recent Approaches to Numerical Analysis. Theory, Methods and Applications*. September 2-5, 2014, Chania (διάλεξη και poster) και στο διεθνές συνέδριο CMA 2014, Kuwait, Nov. 2014
- Στο στάδιο της συγγραφής για το περιοδικό PLOSone βρίσκεται εργασία υπό τον τίτλο: P. Stratis, G. Karatzas, E. Papadopoulou, M. Zakynthinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers* (σε προετοιμασία).
- Η παρούσα Ετήσια Τεχνική Έκθεση του Προγράμματος που αφορά τη Δράση 4.3 για το έτος 2014.

5 Συνεργασίες

Η παρούσα εργασία όπως και οι δημοσιεύσεις της που ακολούθησαν, είναι προϊόν συνεργασίας των παρακάτω μελών του Πολυτεχνείου Κρήτης:

- Ι. Σαριδάκης, Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ε. Μαθιουδάκης, Επίκουρος Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Γ. Καρατζάς, Καθηγητής, Σχολή Μηχανικών Περιβάλλοντος, Πολυτεχνείο Κρήτης

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

- Ε. Παπαδοπούλου, Καθηγήτρια, Σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Μ. Ζακυνθινάκη, Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Π. Στρατής, Υποψήφιος Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- Ν. Βιλανάκης, Υποψήφιος Διδάκτορας, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης

Αναφορές

[1] O. Strack, *Groundwater Mechanics*, Prentice Hall, 1989.

[2] A. Mantoglou, *Pumping management of coastal aquifers using analytical models of salt water intrusion*, Water Resour Res, 39: 1335-1346, 2003.

[3] A. Mantoglou, M. Papantoniou, P. Giannoulopoulos, *Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms*. J Hydrol, 297: 209-228, 2004.

[4] E. Harth, T. Kalogeropoulos, *Multiparameter optimization circuit*, U S Patent, 4: 912-624, 1990.

[5] E. Harth, E. Tzanakou, *Alopex: A stochastic method for determining visual receptive fields*, Vision Research, 14: 1475-1482, 1974.

[6] E. Tzanakou, R. Michalak, E. Harth, *The alopex process: Visual receptive fields by response feedback*, Biol Cybernet, 35: 161-174, 1979.

[7] M. Zakynthinaki, *Stochastic optimization for adaptive correction of atmospheric distortions in astronomical observation*, PhD thesis (in Greek), Technical University of Crete, 2001.

[8] T. Kalogeropoulos, Y. Saridakis, M. Zakynthinaki, *Improved stochastic optimization algorithms for adaptive optics*, Comp Phys Commun, 99: 255-269, 1997.

[9] E. Micheli-Tzanakou, *Supervised and Unsupervised Pattern Recognition: Feature Extraction and Computational Intelligence*, CRC Press, 1999.

[10] M. Zakynthinaki, Y. Saridakis, *Stochastic optimization for a tip-tilt adaptive correcting system*, Comp Phys Commun, 150: 274-292, 2003.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

[11] M. Zakynthinaki, R. Barakat, C.C. Martinez, J.S. Molinuevo, *Stochastic optimization for the detection of changes in maternal heart rate kinetics during pregnancy*, Comp Phys Commun, 182: 683-691, 2011.

[12] Pandya A, Sen E, Hsu S, *Buffer allocation optimization in atm switching networks using alopex algorithm*, Neurocomput, 24: 1-11, 1999.

[13] Pandya A, Venugopal K, *A stochastic parallel algorithm for supervised learning in neural networks*, IEICE Trans Inform Syst, E77-D: 376-384, 1994.

[14] Shintani H, Akutagawa M, Nagashino H, Pandya AS, Kinouchi Y, *Optimization of mlp/bp for character recognition using a modified alopex algorithm*, KES, 11: 371-379, 2007.

[15] Unnikrishnan A, Venugopal K, *Alopex: A correlation-based learning algorithm for feed-forward and recurrent neural networks*, Neural Comput, 6: 469-490, 1992.

[16] Melissaratos L, Micheli-Tzanakou E, *A parallel implementation of the alopex process*, J Med Syst, 13: 243-252, 1989.

[17] Stratis P, Saridakis Y, Zakynthinaki M, Papadopoulou E, *Alopex stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers*, IOP Journal of Physics: Conference Series 490, 2014.

[18] Cheng AD, Halhal D, Naji A, Ouazar D, *Pumping optimization in salt water-intruded coastal aquifers*, Water Resour Res, 36: 2155-2165, 2000.

[19] Katsifarakis K, *Groundwater pumping cost minimization - an analytical approach*, Water Resources Management, 22: 1089-1099, 2007.

[20] Mantoglou A, Papantoniou M, *Optimal design of pumping networks in coastal aquifers using sharp interface models*, J Hydrol, 361: 52-63, 2008.

[21] Sidiropoulos E, Tolikas P, *Well locations and constraint handling in groundwater pumping cost minimization via genetic algorithms*, Water Air Soil Poll, 4: 227-239, 2004.

[22] C.E. Houstis, E.N. Houstis, and J. Rice, *Pde computations: Methods and performance evaluation*, Par. Comp., 5: 141-163, 1997.

[23] *http://www.fenicsproject.org*.

[24] *http://geuz.org/gmsh/*.

[25] *http://www.mathworks.com*.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης