

MATENVMED - MIS 379416

Πλατφόρμα Προηγμένων Μαθηματικών Μεθόδων και
Λογισμικού για την Επίλυση Προβλημάτων Πολλαπλών Πεδίων
(Multi-Physics, Multi-Domain Problems) σε Σύγχρονες
Υπολογιστικές Αρχιτεκτονικές:
Εφαρμογή σε Προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής
και Ιατρικής

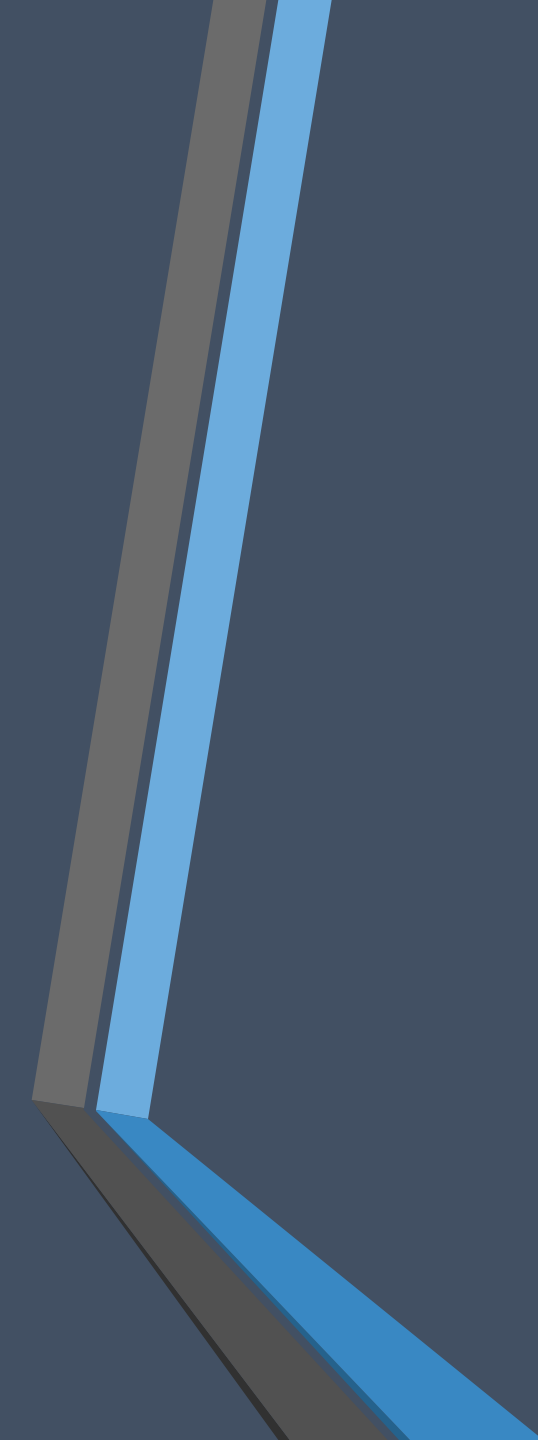
Υποέργο 2 - Δράση 2.2
Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ)

Συνάντηση Αξιολόγησης του Εργου

14-15.11.2015, Χανιά, Κρήτη

Γιώτα Τσομπανοπούλου – Παν. Θεσσαλίας





Υποέργο 2 - Δράση 2.2 Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ)

Περιεχόμενα

- Σκοπός
- Μεθοδολογία
- Αποτελέσματα
- Παραδοτέα
- Συνεργασίες
- Μελλοντικές Δράσεις



Σκοπός

Σκοπός Δράσης 2.2 – Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ)

- 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

Σκοπός Δράσης 2.2 – Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ)

- επισκόπηση μεθόδων για επίλυση προβλημάτων πολλαπλών φυσικών και χωρίων,
- επισκόπηση υπαρχόντων μεθόδων χαλάρωσης στη διεπαφή για ελλειπτικά και παραβολικά προβλήματα,
- έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ σε προβλήματα με μη-κανονικά πεδία,
- έλεγχο και επαλήθευση αλγορίθμων με ασύγχρονη συμπεριφορά, και
- έλεγχο και επαλήθευση των ΜΧΔ σε προβλήματα που προκύπτουν από τις εφαρμογές του έργου



Μεθοδολογία

Μεθοδολογία

- Επισκόπηση Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών χωρίων-πολλαπλών φυσικών μοντέλων
- Επισκόπηση Μεθόδων Χαλάρωσης στις Διεπαφές (ΜΧΔ)
- Επαλήθευση αλγορίθμων ΜΧΔ (σειριακά, παράλληλα)
- Επαλήθευση ΜΧΔ σε μη κανονικές γεωμετρίες
- Μελέτη ΜΧΔ με ασύγχρονη ροή εργασιών

Επισκόπηση Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών χωρίων-πολλαπλών φυσικών μοντέλων

- Πραγματικά προβλήματα
- Μηχανές (αεροπλάνα, αυτοκίνητα,....)
- Φυσικά φαινόμενα (κλίμα, σεισμοί, ...)
- Λειτουργία ανθρώπινων οργάνων (καρδιά, ...)
- ... κλπ.

Επισκόπηση Μεθόδων επίλυσης προβλημάτων πολλαπλών χωρίων-πολλαπλών φυσικών μοντέλων

- Πολλά επιμέρους προβλήματα με διαφορετικές αρχές (εξέλιξης/ισσοροπίας)
- Νόμοι διατήρησης / κατάστασης
- Σύζευξη μέσω τελεστών
- Σύζευξη μέσω διεπαφών
- Αλγεβρική περιγραφή

Σύζευξη μέσω τελεστών

- Πολλαπλοί/Διαφορετικοί τελεστές σε επικαλυπτόμενα χωρία
- Παραδείγματα:
 - Radiation hydrodynamics in astrophysics
 - Electricity and magnetism with hydrodynamics in plasma physics
 - Chemical reaction with transport in combustion/subsurface flows
 - κλπ.

Σύζευξη μέσω διεπαφών

- Παρακείμενα υποχωρία
- Οι συνθήκες στις διεπαφές «δένουν» μεταξύ τους τα υποπροβλήματα
- Συνέχεια/Πεπερασμένη ασυνέχεια με πήδημα στη συνάρτηση/παράγωγο
- Παραδείγματα
 - Fluid-structure dynamics in aeroelasticity
 - Ocean-atmosphere dynamics in geophysics
 - κλπ.

Αλγεβρική περιγραφή

- Coupled equilibrium problem: $F(u) \equiv (F_1(u_1, u_2), F_2(u_1, u_2)) = 0$
- Αλγόριθμοι:

Jacobi

Given initial guess $u = (u_1^0, u_2^0)$

For $k=1, 2, \dots$ (until convergence)
Solve for (u_1^{k+1}, u_2^{k+1})

$$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$$

$$F_2(u_1^k, u_2^{k+1}) = 0$$

endfor

Αλγεβρική περιγραφή

- Coupled equilibrium problem: $F(u) \equiv (F_1(u_1, u_2), F_2(u_1, u_2)) = 0$
- Algorithms:

Gauss-Seidel

Given initial guess $u = (u_1^0, u_2^0)$

For $k=1, 2, \dots$ (until convergence)
Solve for (u_1^{k+1}, u_2^{k+1})

$$F_1(u_1^{k+1}, u_2^k) = 0$$

$$F_2(u_1^{k+1}, u_2^{k+1}) = 0$$

endfor

Αλγεβρική περιγραφή

- Coupled equilibrium problem: $F(u) \equiv (F_1(u_1, u_2), F_2(u_1, u_2)) = 0$
- Algorithms:

Newton

Given initial guess $u = (u_1^0, u_2^0)$

For $k=1, 2, \dots$ (until convergence)

Solve for δu

$$J(u^k) \delta u = -F(u^k)$$

$$\text{Update } u^{k+1} = u^k + \delta u$$

endfor

where, $J = \partial(F_1, F_2) / \partial(u_1, u_2)$,
 $u = (u_1, u_2)$

Αλγεβρική περιγραφή

- Coupled evolution problem: $\partial_t u_1 = f_1(u_1, u_2)$ @ $\partial_t u_2 = f_2(u_1, u_2)$
- Algorithms:

Given initial guess $u = (u_1(t_0), u_2(t_0))$

For $n=1, 2, \dots, N_t$

Proceed one timestep for u_1 solving $\partial_t u_1(t_n) = f_1(u_1(t_n), u_2(t_{n-1}))$

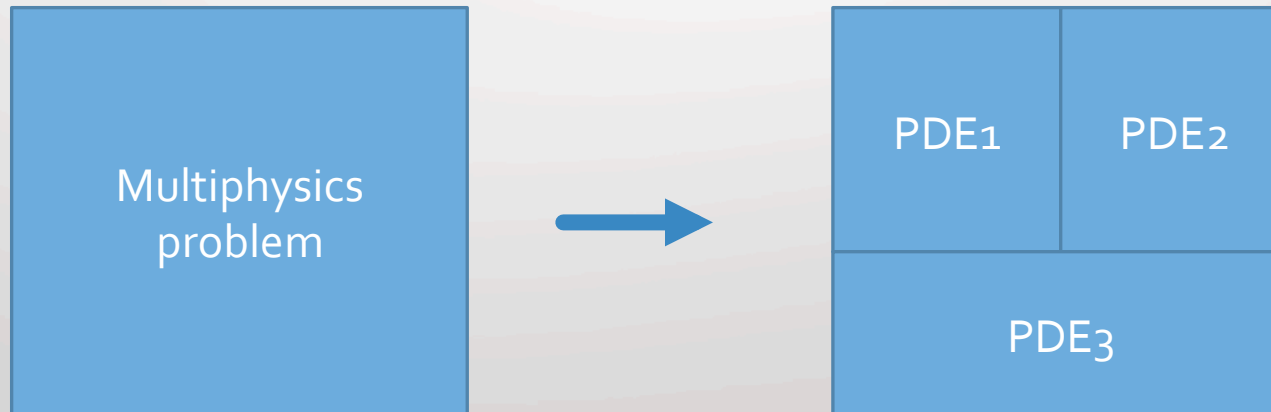
Proceed one timestep for u_2 solving $\partial_t u_2(t_n) = f_2(u_1(t_n), u_2(t_n))$

endfor

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές

Θεωρούμε ότι:

- Σύνθετο πρόβλημα = πολλά «απλά» επιμέρους προβλήματα ΜΔΕ, «απλή» γεωμετρία και «απλή» ΔΕ
- Υπάρχουν επιλυτές για τα «απλά» επιμέρους προβλήματα



Μεθοδολογία Χαλάρωσης στις Διεπαφές

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.

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές

- Primitive Relaxers
 - Smooth values and normal derivatives in various ways
 - About 8 have been proposed, implemented and analyzed
- Advanced Relaxers
 - Smooth additional operators (continuity of mass, temperature, conservation of energy/ momentum, equilibrium conditions, Lagrange multipliers, Steklov-Poincare operators, ...)
- Differences in convergence and applicability

Μέθοδοι Χαλάρωσης στις Διεπαφές

Πλεονεκτήματα:

- Σύζευξη πολλών μοντέλων για ΜΔΕ ή διεπαφές με ακρίβεια
- Χρήση υπάρχοντος λογισμικού για τη λύση των επιμέρους προβλημάτων ΜΔΕ)
- Μεγάλου βαθμού παραλληλία
- Ακολουθούμε τη φυσική των προβλημάτων

ΜΧΔ για Ελλειπτικές ΔΕ

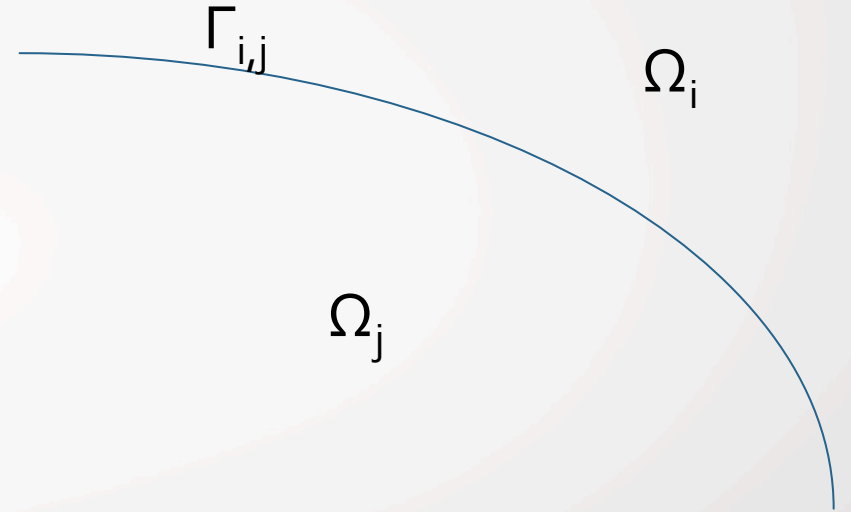
Local PDEs denoted as:

- $L \downarrow i u \downarrow i = f \downarrow i$ in $\Omega \downarrow i$ for $i=1, \dots, p$
- $\Omega \downarrow i$ do not overlap
- Implicit form of interface conditions

$G \downarrow i, j (u \downarrow i, \partial u \downarrow i / \partial \eta \downarrow i, j ; u \downarrow j, \partial u \downarrow j / \partial \eta \downarrow j, i ; j \downarrow 1, j \downarrow 2) = 0$ on $\Gamma \downarrow i, j \equiv \Omega \downarrow i \cap \Omega \downarrow j$,

$\eta \downarrow i, j$ normal direction on $\Gamma \downarrow i, j$ and J_1, J_2 jumps of u or its derivative

- Studied methods: AVE, ROB, GEO, ...



AVE

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

- Define:

$$g_{i,j} = \beta_{i,j} \frac{\partial u_i^{(2k)}}{\partial \eta_{i,j}} + (1 - \beta_{i,j}) \frac{\partial u_{i+1}^{(2k)}}{\partial \eta_{j,i}}, \text{ on } \Gamma_{i,j}, i, j = 1, \dots$$

- Solve all the Neumann problems:

$$L_i u_i^{(2k+1)} = f_i, \text{ in } \Omega_i, i = 1, \dots$$

$$\frac{\partial u_i^{(2k+1)}}{\partial \eta_{i,j}} = g_{i,j}, \text{ on } \Gamma_{i,j}, j = \dots$$

with all boundary conditions (if any)

AVE (cont'd)

- Define:

$$h_{i,j} = \alpha_{i,j} u_i^{(2k+1)} + (1 - \alpha_{i,j}) u_{i+1}^{(2k+1)}, \quad \text{on } \Gamma_{i,j}, \quad i, j = 1, \dots$$

- Solve the Dirichlet problems:

$$L_i u_i^{(2k+2)} = f_i, \quad \text{in } \Omega_i, \quad i = 1, \dots$$

$$u_i^{(2k+2)} = h_{i,j}, \quad \text{on } \Gamma_{i,j}, \quad j = \dots$$

with all boundary conditions (if any)

GEO

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

- Define:

$$g_{i,j} = \frac{u_i^{(k)} + u_j^{(k)}}{2} + \rho_i \left(\frac{\partial u_i^{(k)}}{\partial \eta_{i,j}} + \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial \eta_{j,i}} \right), \text{ on } \Gamma_{i,j} \quad i, j = 1, \dots,$$

- Solve the Dirichlet problems:

$$L_i u_i^{(k+1)} = f_i, \text{ in } \Omega_i, \quad i = 1, \dots$$

$$u_i^{(k+1)} = g_{i,j}, \text{ on } \Gamma_{i,j}, j = \dots$$

with all boundary conditions (if any)

ROB

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

- Define:

$$g_{i,j} = \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial \eta_{j,i}} + \lambda_{i,j} u_j^{(k)}, \text{ on } \Gamma_{i,j} \quad i, j = 1, \dots,$$

- Solve the problems:

$$L_i u_i^{(k+1)} = f_i, \text{ in } \Omega_i, \quad i = 1, \dots$$

$$-\frac{\partial u_i^{(k+1)}}{\partial \eta_{i,j}} + \lambda_{i,j} u_i^{(k+1)} = g_{i,j}, \text{ on } \Gamma_{i,j}, j = \dots$$

with all boundary conditions (if any)

ΜΧΔ για παραβολικά προβλήματα ΔΕ

Follow the algebraic formulations.

Preliminary iteration scheme:

1. Consider initial values on interfaces (use initial condition of global problem)
2. For each timestep:
 - i. Evolve all single PDEs. Solve each PDE at next timestep using interface conditions and/or boundary conditions.
 - ii. Combine values/derivatives to get “good” values for next timestep on interfaces (may be iteratively)

Μελέτη αλγορίθμων για ΜΧΔ σε Μη κανονικές Γεωμετρίες

- Εντοπισμός γειτονικών σημείων από τα παρακείμενα υποχωρία για τον υπολογισμό των νέων τιμών πάνω στις διεπαφές
 - Λίστα σημείων συνόρων-διεπαφών
 - K-D tree με τα σημεία των συνόρων-διεπαφών (ως προς τη γειτνίαση) για κάθε χωρίο
- Παρεμβολή τιμών συνάρτησης με κόμβους πάνω σε καμπύλες
 - Παρεμβολή σε πολλές διαστάσεις (2Δ ή 3Δ)
 - Παρεμβολή σε παραμετρικές καμπύλες που ορίζουν οι διεπαφές

Μελέτη παραλληλισιμότητας των ΜΧΔ

- Παράλληλοι αλγόριθμοι με αυστηρό συγχρονισμό ανά βήμα της ΜΧΔ
- Παράλληλοι αλγόριθμοι με χαλαρό (ή καθόλου) συγχρονισμό (ασύγχρονη ροή εργασιών)

Μελέτη ΜΧΔ για τα προβλήματα εφαρμογών Ιατρικής και Περιβαλλοντικής Μηχανικής

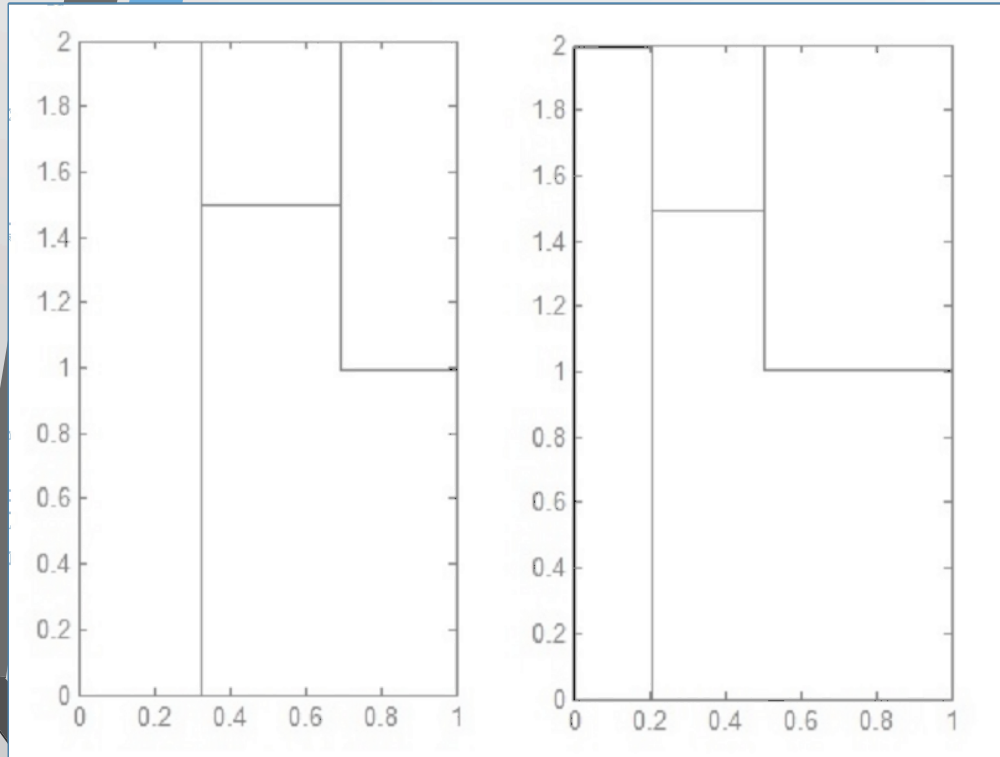
- Χαρακτηριστικά και ιδιότητες των προβλημάτων της διάδοσης των καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο
- Χαρακτηριστικά και ιδιότητες των προβλημάτων της υφαλμύρισης
- Δημιουργία μεθόδων που να διατηρούν τις ιδιότητες, επιβάλλοντας κατάλληλες συνθήκες.

Αποτελέσματα

Αποτελέσματα Δράσης 2.2

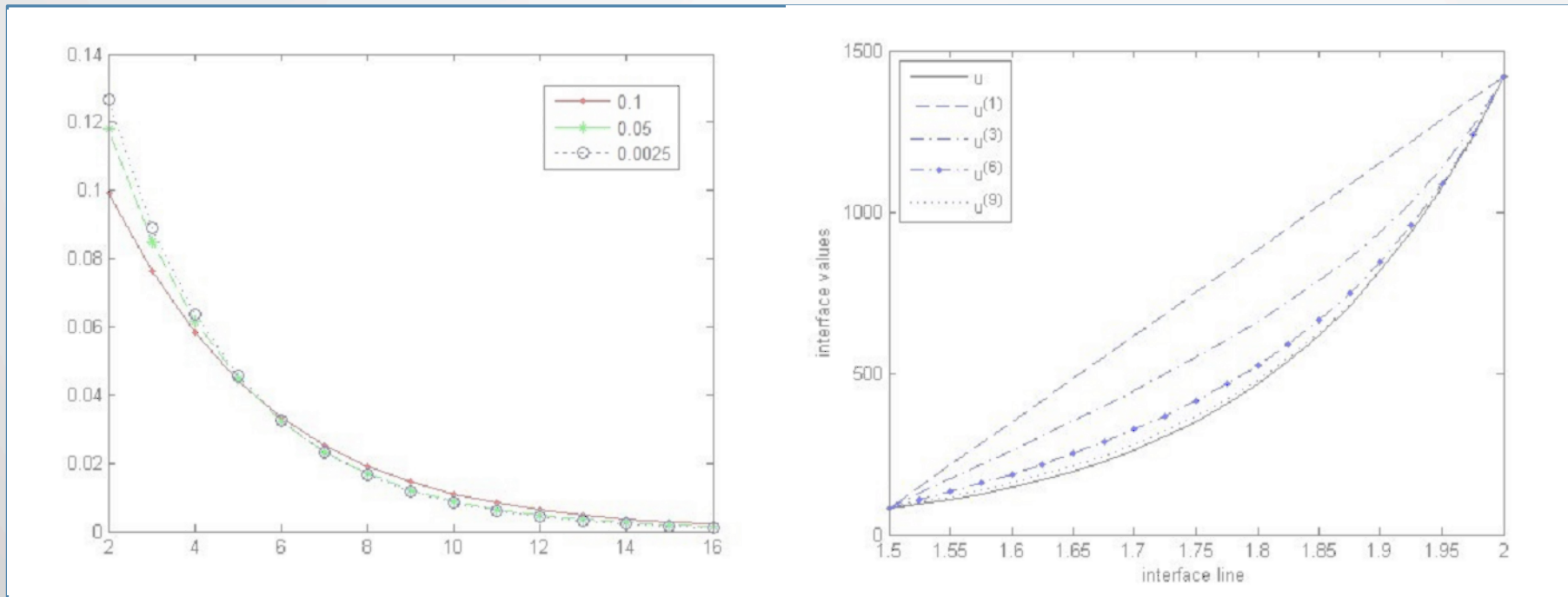
- Επαλήθευση 2 ΜΧΔ για ελλειπτικά προβλήματα (GEO, ROB)
 - Σειριακά, παράλληλα (αυστηρό συγχρονισμό), ασύγχρονα
- Υλοποίηση αλγόριθμου για εύρεση γειτονικών σημείων σε μη κανονικές γεωμετρίες
- Δημιουργία νέας ΜΧΔ τύπου GEO για παραβολικά προβλήματα
- Δημιουργία νέας ΜΧΔ τύπου ROB για παραβολικά προβλήματα

Προβλήματα για επαλήθευση αλγορίθμων



		Uniform problem			Non-uniform problem		
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

Επαλήθευση σύγκλισης των μεθόδων

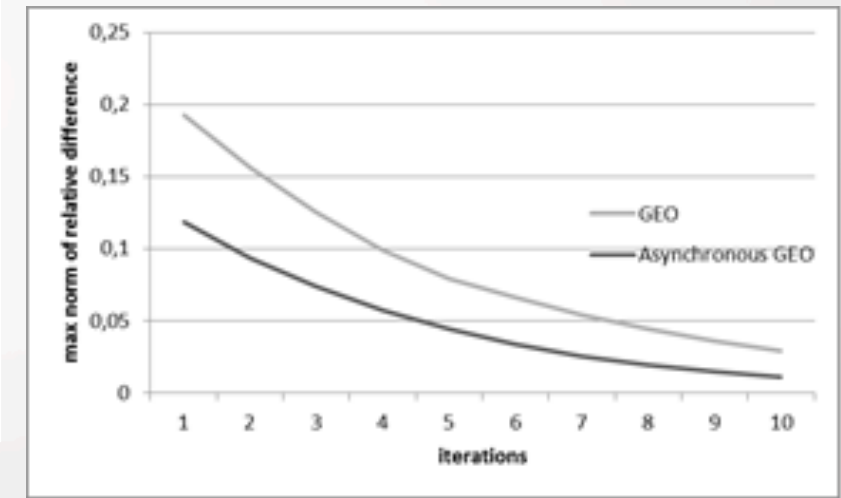


Ιστορικό σύγκλισης

Ακριβής λύση και προσεγγίσεις

Επαλήθευση παραλληλισμότητας των ΜΧΔ

	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



Case	Execution Times	
	Asynchronous GEO	Synchronous GEO
c1	12.12	3.495
c2	12.361	4.068
c3	11.81	6.14
c4	7.727	13.595
c5	14.805	39.808
c6	38.022	154.633
c7	256.084	723.731

Νέες ΜΧΔ - Εφαρμογή σε πρόβλημα υφαλμύρισης σε υδροφορέα στην Κάλυμνο

Νέα GEO

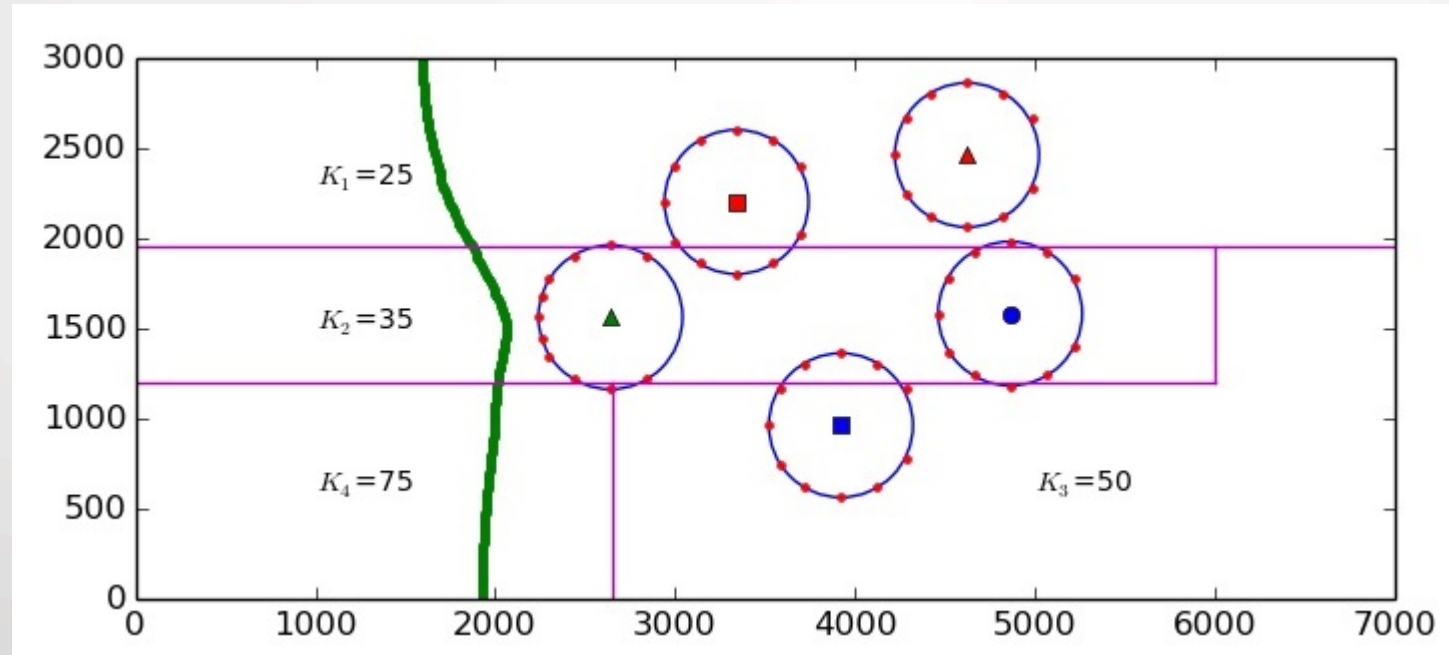
$$g_{i,j} = \frac{u_i^{(k)} + u_j^{(k)}}{2} - \rho_i \left(\mathbf{K}_i \frac{\partial u_i^{(k)}}{\partial \eta_{i,j}} - \mathbf{K}_j \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial \eta_{j,i}} \right), \text{ on } \Gamma_{i,j} \quad i, j = 1, \dots,$$

Νέα ROB

$$g_{i,j} = \mathbf{K}_j \frac{\partial u_j^{(k)}}{\partial \eta_{j,i}} + \lambda_{i,j} u_j^{(k)}, \text{ on } \Gamma_{i,j} \quad i, j = 1, \dots,$$

$$-\mathbf{K}_i \frac{\partial u_i^{(k+1)}}{\partial \eta_{i,j}} + \lambda_{i,j} u_i^{(k+1)} = g_{i,j}, \text{ on } \Gamma_{i,j}, j = \dots$$

Εφαρμογή σε πρόβλημα υφαλμύρισης σε υδροφορέα στην Κάλυμνο

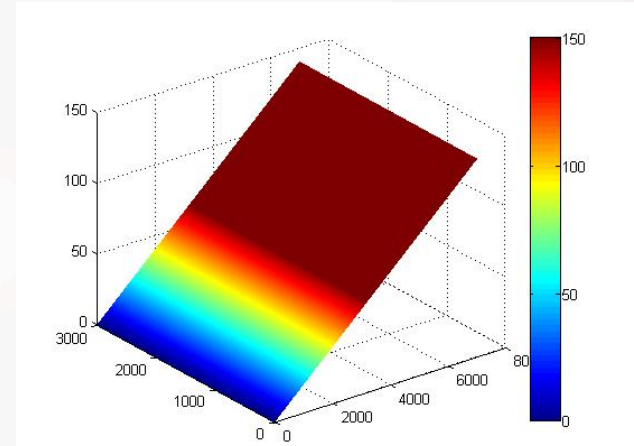
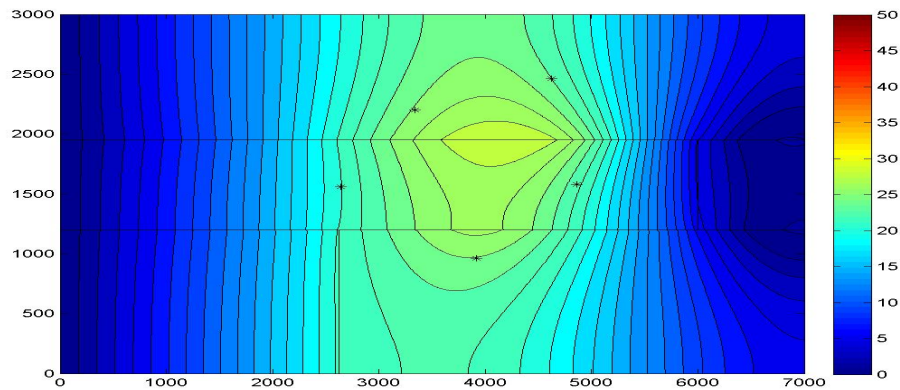
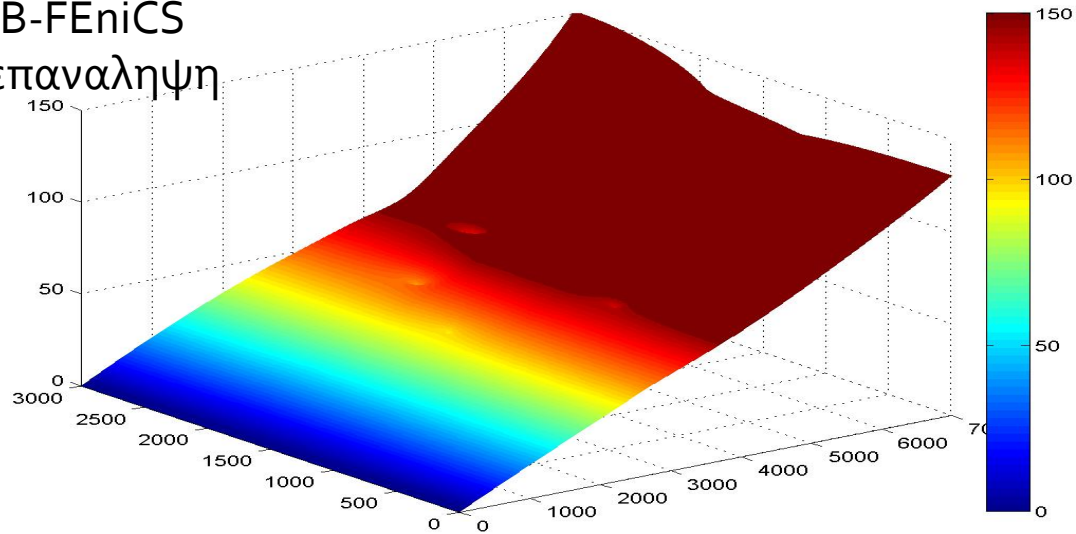


$$\frac{\partial}{\partial x} (K \frac{\partial \phi}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K \frac{\partial \phi}{\partial y}) + N - Q = 0$$

Εφαρμογή σε πρόβλημα υφαλμύρισης σε υδροφορέα στην Κάλυμνο

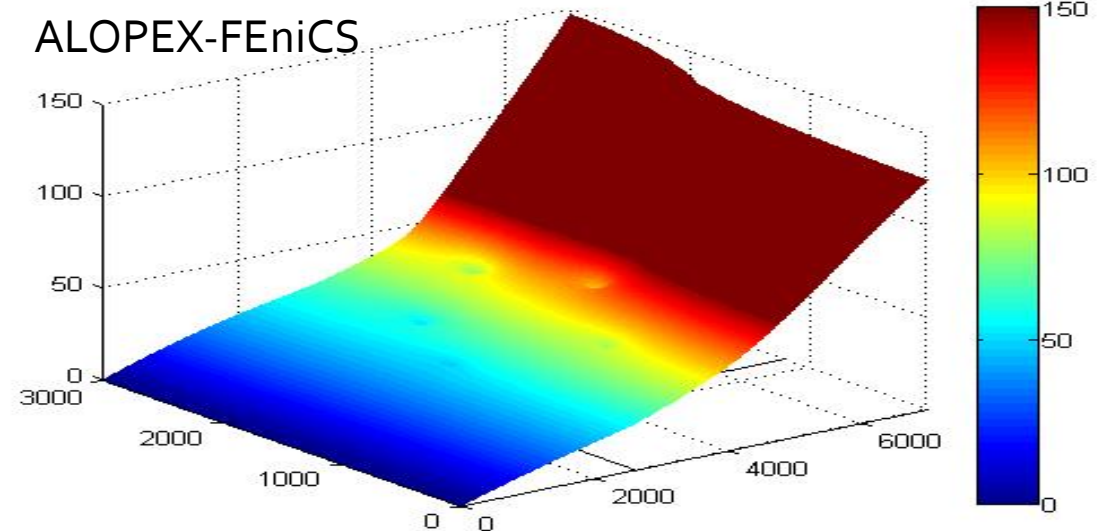
ROB-FEniCS

7^η επαναληψη



Αρχική τιμή

ALOPEX-FEniCS



Παραδοτέα

Παραδοτέα

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. Likiothanassis, 6th International Conference on Numerical Analysis (NUMAN2014), Sept. 2-5, 2014, Chania, Greece, pp 167-173.

IRaaS: A Cloud Implementation of an Interface Relaxation Method for the Solution of PDEs, A. Korfiati, N. Sfika, K. Daloukas, C. Alexakos, P. Tsompanopoulou, S. Likiothanassis, The 2015 International Conference of Parallel and Distributed Computing (ICPDC 215), July 1-3, 2015, London, U.K.

An Asynchronous Interface Relaxation Method for Multi-domain/Multi-physics Problems, A. Korfiati, S. Likiothanassis, P. Alefragis, K. Daloukas, P. Tsompanopoulou, 13th International Conference of Numerical Analysis & Applied Mathematics, Sept 23-29, 2015, Rhodes, Greece.

Παραδοτέα

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

Προσθήκες σε πλατφόρμα FEniCS για την εύρεση των γειτονικών σημείων των διεπαφών σε μη κανονικές γεωμετρίες με χρήση των KD trees.

Προσθήκες σε πλατφόρμα FEniCS για τη δημιουργία γραφικών παραστάσεων των λύσεων στο αρχικό χωρίο του προβλήματος.

Τεχνική έκθεση περιγραφής αποτελεσμάτων



Συνεργασίες

Συνεργασίες

	ΚΕΟ 1	ΚΕΟ 2	ΚΕΟ 3
Επαλήθευση GEO (σειριακά)		X	X
Επαλήθευση ROB (σειριακά)		X	X
Επαλήθευση GEO (cloud)		X	X
Επαλήθευση ROB (distributed)		X	X
Επαλήθευση GEO (ασύγχρονα)		X	X
Μελέτη GEO – Collocation (πρόβλημα εγκεφάλου)	X	X	
Μελέτη GEO – Alopex – FEniCS (πρόβλημα υφαλμύρισης – υδροφορέας Καλύμνου)	X	X	X



Μελλοντικές Δράσεις

Μελλοντικές Δράσεις

- Ολοκλήρωση θεωρητικής μελέτης ΜΧΔ για παραβολικά προβλήματα
- Εφαρμογή των μεθόδων σε προβλήματα Περιβαλλοντικής Μηχανικής (προβλήματα υφαλμύρισης Καλύμνου και Χερσονήσου)
- Εφαρμογή των μεθόδων σε προβλήματα Ιατρικής (πρόβλημα εγκεφάλου)

Ευχαριστίες

Η παρούσα ερευνητική εργασία έχει συγχρηματοδοτηθεί από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο ΕΚΤ) και ελληνικά εθνικά κονδύλια μέσω του Επιχειρησιακού Προγράμματος Εκπαίδευσης και Δια Βίου Μάθησης του Εθνικού Στρατηγικού Πλαισίου Αναφοράς (ΕΣΠΑ) –

Ερευνητικό Πρόγραμμα Χρηματοδότησης: ΘΑΛΗΣ. Επένδυση στην κοινωνία της γνώσης μέσω του Ευρωπαϊκού Κοινωνικού Ταμείου (MIS 379.416).





Ευχαριστώ