

МИНИСТЕРСТВО НА ОБРАЗОВАНИЕТО, МЛАДЕЖТА И
НАУКАТА

ФОНД „НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ“

НАУЧЕН ОТЧЕТ

за работата по договор ДО02-147/2008

на тема

„Методи, алгоритми и софтуерни средства за задачи
с голяма размерност и йерархични компютърни
модели“

за периода декември 2008 г. — септември 2010 г.
(първи етап)

Ръководител на договора: доц. д-р Иван Лирков

Базова научна организация: ИИКТ, БАН.

СЪДЪРЖАНИЕ

1. Резултати през отчетния период
2. Списък на научните публикации
3. Финансов отчет
4. Справка за дълготрайни материални активи
5. Списък на научния колектив
6. Приложение: Копия от научните публикации

1 Резултати през отчетния период

1.1 Неконформни крайни елементи

1.1.1 Неконформен МКЕ за елиптични задачи от четвърти ред

Многонивовите итеративни методи безспорно са важен инструмент при решаване на задачи с голяма размерност. Освен чрез резултантната алгебрична система, такива задачи биха могли да бъдат атакувани и чрез самата реализация по МКЕ за моделната постановка. Използването на различни неконформни подходи в МКЕ дава прекрасна възможност в това отношение.

Елиптичните гранични задачи от четвърти ред описват важни модели от инженерната практика. Достатъчно е да споменем теорията на твърдите огъвни плочи. Съответните спектрални задачи са важен инструмент за оразмеряване на разнообразни инженерни конструкции.

Известно е, че компютърната реализация по МКЕ за такива задачи изисква приближеното решение да удовлетворява C^1 -условието, което означава гладкост, изразяваща се в непрекъснатост на производните между всеки два съседни крайни елемента. Това условие определя и голямата размерност на крайноелементната система. Неконформният МКЕ е основен начин за намаляване на тази размерност и за улесняване решаването на задачите от четвърти ред. Използването на неконформни крайни елементи обаче изисква внимателен и точен анализ, за да се осигури сходимост и задоволителна точност на приближеното решение.

В статии [2, 6] се анализира и прилага модифициран от авторите елемент на Зенкевич, който е конформен за задачи от втори ред, но е неконформен по отношение на задачите от четвърти ред. Използването на елемент на Зенкевич (Zienkiewicz-type FE) е интересно с факта, че за задачи от четвърти ред то осигурява сходимост на приближеното към

точното решение с минимален брой степени на свобода. Тази сходимост е доказана по много оригинален начин в [2, 6]. В същите публикации е предложен апостериорен алгоритъм, като се анализира комбинацията на Z -type елемента с други два конформни крайни елемента, която дава много висока точност при решаване на бихармонична спектрална задача. Цитираните резултати са публикувани в едно от най-авторитетните европейски списания по числен анализ с висок импакт-фактор.

На ускоряване на сходимостта при спектрални задачи от четвърти ред е посветена работата в [5]. В нея се предлага оригинална апостериорна процедура за повишаване точността на приближеното решение по МКЕ, при използване на елемент на Зенкевич.

1.1.2 Линеен неконформни крайни елементи от интегрален тип

В посочените по-горе статии се изучават свойствата и приложенията на триъгълния неконформен краен елемент на Crouzeix-Raviart, но вместо за степен на свобода (традиционно) да се вземе стойност в точка, се използват стойности на интегралите върху страните на всеки триъгълен краен елемент. Освен с простата си компютърна реализация, този краен елемент се отличава с редица интересни и полезни свойства.

Известно е, че приближените собствени стойности, получени по конформен МКЕ, апроксимират точните собствени стойности отгоре, т.е. приближените са по-големи от точните стойности. Ето защо оценките отдолу са особено полезни не само в теоретичен план, но имат и важно практическо значение. Долна граница на собствените стойности за изпъкнали области за пръв път се докладва на European Finite Element Fair 2010 (Warwick, United Kingdom) (вж. http://www2.warwick.ac.uk/fac/sci/math/research/events/2009_2010/workshops/efef10/participants/racheva_efef2010.pdf) и е представена в [20]. Този безспорен научен ус-

пех, който отчитаме с настоящия проект, предизвика силен интерес от страна на водещи световни учени, които работят в областта на вариационните числени методи. В [20] е направен аналитичен обзор на елементи с интегрални степени на свобода. Показани са някои техни предимства при компютърна реализация за гранични задачи. Има представени нови за изчислителната практика елементи, които са оригинално дело на авторите. Настоящата работа се оказва полезна и в учебния процес и предизвика поредица от научни семинари на катедра „Математика“ при ТУ-Габрово по тази тематика.

В [4] се дава метод за значително повишаване на точността на линейните неконформни крайни елементи от интегрален тип. Разгледана е апостериорна покриваща техника (patch-recovery technique) за елементи на Crouzeix-Raviart и се дискутира ефектът при компютърната реализация.

1.2 Многонивови и мултигрид алгоритми

Итерационните методи играят съществена роля при решаване на линейни уравнения свързани с различни приложения. Свойствата на задачата могат съществено да повлияят на ефективността при намиране на решението. В монографията [1] се разглеждат алгоритми за решаване на системи линейни алгебрични уравнения с голяма размерност и разрежена структура, получени при дискретизация на частни диференциални уравнения по метода на крайните елементи. Представени са подробно последните постижения в областта на робастните алгебрични многонивови методи и алгоритми, като метод на спрегнатия градиент с преобуславяне, алгебрични многонивови итерационни преобусловители (AMLI) и класически алгебричен мултигрид (AMG) метод.

Нов подход за решаване на линейни елиптични уравнения е предста-

вен в [19]. Изследвана е сходимостта на мултигрид солвър, който използва непрекъсната хомогенизирана задача за дефиниране на операторите на грубото ниво. Методът използва аналитична форма на оператора на грубото ниво, която може да се приложи не само за материали с периодични свойства. Числените резултати показват устойчивостта на така конструирания алгоритъм.

1.2.1 Алгебрични многонивови преобусловители AMLI

Проведени са подробни числени експерименти, целящи изследване на скоростта на сходимост на програмна реализация на оптимални многонивови методи за случая на граф-Лапласиани с тегла. Тестовите са извършени в три логични стъпки: изследване на свойствата на предложеното двунивово разделяне, изследване на сходимостта на AMLI W-цикъл за случая, когато системите с водещите диагонални блокове се решават точно и изследване на сходимостта на AMLI W-цикъл за случая, когато матриците на системите с водещите диагонални блокове се приближават с диагонална апроксимация. Резултатите са публикувани в [9], където е показано, че алгебрични многонивови преобусловители (AMLI) могат да се прилагат успешно, както за скаларните елиптически задачи от адвективно-дифузионната стъпка, така и за решаване на дискретната система за смесената форма на проекционната стъпка. Резултатите от проведените числени експерименти потвърждават теоретичните очаквания, че конструираните AMLI преобусловители имат оптимална изчислителна сложност.

В [24] е конструиран преобусловител за решаване на линейната система уравнения, която възниква при дискретизация на елиптически гранични задачи от втори ред със смесен метод на крайните елементи. Дискретизацията е с неконформни крайни елементи на Crouzeix-Raviart за скоростта и на части константи за налягането. По този начин задачата

се свежда до решаване на система с матрица граф-Лапласиан (с тегла). За преобусловител е използван AMLI алгоритъм, в който се използва полиномиално приближение на обратните матрици на пивотните блокове при разделяне 2×2 . Конструиранията апроксимация дава достатъчна точност и освен това гарантира положителна определеност на всеки пивотен блок.

За решаването на елиптична задача от втори ред, която възниква при прилагане на проекционен алгоритъм за уравнение на Navier-Stokes, в [8] са конструирани оптимални AMLI преобусловители. За дискретизация на задачата са използвани неконформни елементи на Crouzeix-Raviart за скоростта и на части константи за налягането, което осигурява локално запазване на масата. Тогава матрицата на масата е диагонална и може да се направи елиминация на неизвестните за скоростта. Редуцираната матрица за налягането се разглежда като претеглен граф-Лапласиан. За тази задача ефективността на AMLI преобусловителите зависи от: свойствата на двунивовото разделяне, които се характеризират с константата γ в усиленото неравенство на Cauchy-Bunyakowski-Schwartz (CBS), и апроксимацията на пивотните блокове. Проведени са числени експерименти, които показват, че предложеното йерархично разделяне дефинира подходящ двунивов преобусловител и скоростта му на сходимост не зависи от размерността на задачата.

В [11] е представен оптимален многонивов преобусловител от тип AMLI за линейни задачи от теория на еластичността с наложени гранични условия на Дирихле (pure displacement problems), които са дискретизирани с крайни елементи на Crouzeix-Raviart. Нека припомним, че сходимостта на AMLI алгоритъма зависи съществено от CBS константата γ , която се оценява с максималната от локалните (макроелементните) константи. Числено е изследвано многонивовото поведение на локалната CBS константа, като е наблюдавана равномерна ограниченост по отно-

шение частното на Поасон ν включително и когато клони към границата на несвиваемост $\nu \rightarrow \frac{1}{2}$. Проведените числени експерименти потвърждават оптималната изчислителна сложност на метода по отношение размера на дискретната задача и съответните параметри на диференциалната задача.

1.3 Преобусловители от тип модифицирана непълна факторизация MIC(0)

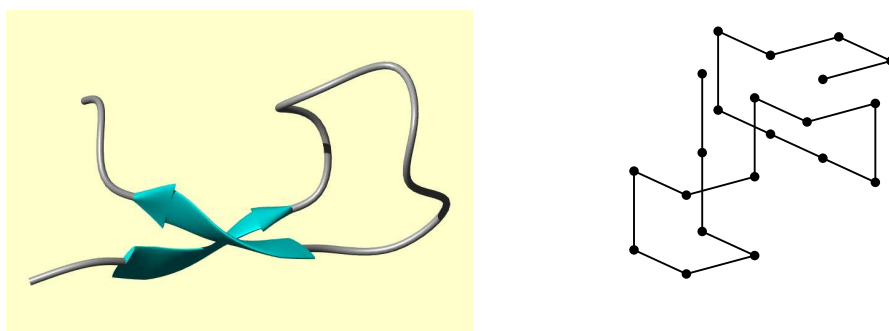
Друг подход за конструиране на робастен неконформен метод на крайните елементи за линейни еластични задачи се основава на прилагането на смесен метод за \mathbf{u} и $\operatorname{div} \mathbf{u}$, като с \mathbf{u} е означен вектора от неизвестните премествания. Така получената дискретна задача е от тип намиране на седлова точка. Чрез избора на неконформни крайни елементи, дуалната променлива може да се изключи на макроелементно ниво, при което се получава симетрична и положително определена система линейни алгебрични уравнения за преместванията. Този подход е известен като Reduced and Selective Integration (RSI). За преобуславяне на получените системи линейни алгебрични уравнения използваме декомпозиция по премествания (Displacement Decomposition – DD). Тук преобусловителя се дефинира в блочно диагонална форма, като отделните блокове са приближения (преобусловители) на матрици на коравина, съответстващи на скаларни елиптични билинейни форми. В [12] са представени такива преобусловители от тип модифицирана непълна факторизация на Холецки от нулев ред (MIC(0)) за системи линейни уравнения, получени при дискретизация на анизотропни скаларни елиптични задачи с неконформни крайни елементи на Rannacher-Turek. Получени са оценки за числото на обусловеност и изчислителната сложност. Проведените числени експерименти потвърждават получените теоретични резултати

и показват стабилното поведение на преобусловителя при големи скокове на коефициентите и вариране коефициента на анизотропия.

1.4 Компютърни модели в биомедицината

В [10] е разгледана задачата за пространственото разположение на аминокиселините в белтъчните молекули. Това е фундаментална задача в изчислителната молекулярна биология и биохимична физика. Тримерната структура на протеина е ключ към разбирането и манипулирането на неговите биохимични и клетъчни функции. Цялата информация, необходима за намиране на тримерната структура на протеина, се съдържа в последователността на аминокиселините в него. Използвайки опростени модели, пак стигаме до NP-пълна задача. Стандартните изчислителни подходи не са достатъчно мощни за намиране на правилната структура в огромното пространство от възможни структури. Поради сложността на задачата, опростените модели като хидрофобен-полярен (HP) станаха основно средство за изучаване на структурата на протеина. Различни оптимизационни методи се прилагат за решаване на задачата, включително Монте Карло, еволюционни алгоритми и метод на мравките (ant colony optimization — ACO). В тази статия е конструиран ACO алгоритъм за намиране на тримерната структура на протеин, основан на много прост избор по отношение на компонентите на решението. Получените резултати са сравнени с други специализирани методи за решаване на тази задача. Емпиричните резултати показват, че предложеният алгоритъм е по-добър при намиране структурата на стандартни тестови примери на белтъчни молекули. Получени и анализирани са резултати за протеини с известна тримерна структура (виж Фиг. 1).

Разработен е компютърен модел на радио-честотна аблация на чернодробни тумори, който включва топлинните и електрически процеси



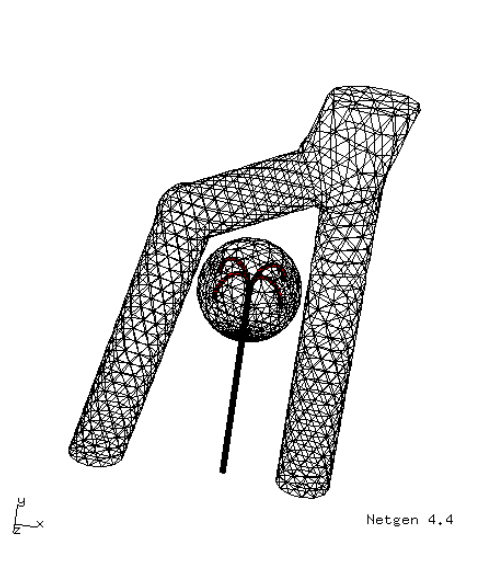
Фигура 1: Тримерна структура на Хепсидин.

в чернодробната тъкан. Аблацията е алтернативен метод за лечение на злокачествени заболявания на черния дроб. Тя се извършва с помощта на микроскопична сонда, инжектирана в/до туморната тъкан, по която се пуска ток с определена честота и напрежение. Целта е туморната тъкан да бъде унищожена посредством нагряване.

При температури от 45°C – 50°C , вътрешно-клетъчните протеини се денатурират и се разрушават клетъчните мембрани. По време на процеса температурата не бива да надвишава 90°C , за да се избегне прегряване на хирургическия инструмент. Термо-електрическият модел на процеса е дискретизиран посредством метода на крайните елементи.

Изследвани са режими на работа на сонда с механично разтварящ се накрайник, работеща на принципа на директно въздействие. Специален интерес от медицинска гледна точка представлява опасността от прегряване на разположени в непосредствена близост големи кръвоносни съдове. Голямата дискретна размерност на задачата е в резултат от относително малките размери (дебелина) на накрайника на сондата.

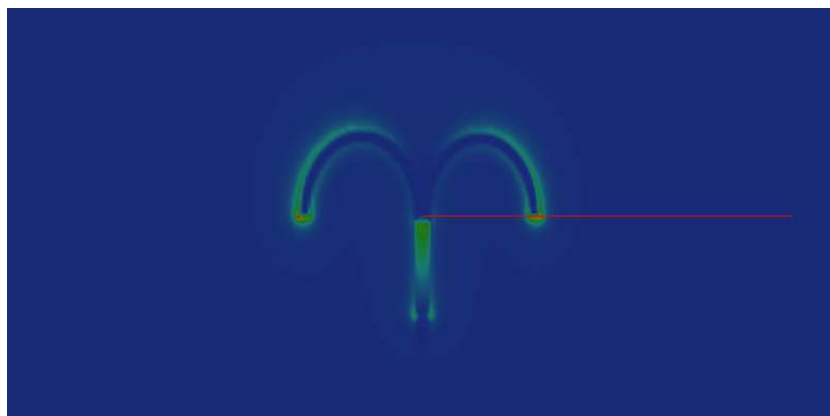
Използвано е вокселно представяне на тримерната област с голяма разделителна способност: $256 \times 256 \times 256$, $322 \times 322 \times 322$, $406 \times 406 \times 406$ и $512 \times 512 \times 512$. Областта се състои от чернодробната тъкан и минава-



Фигура 2: Мрежа от кръвоносните съдове, тумора и сондата



Фигура 3: Изчислителна област при моделиране на радио-честотна аблация на чернодробни тумори



Фигура 4: Отделена топлина при моделиране на радио-честотна аблация на чернодробни тумори

щите през нея кръвоносни съдове (виж Фиг. 2). Кръвта в кръвоносните съдове е с по-малко електрическо съпротивление, и освен това отвежда топлината, получена в резултат от дифузията и на преминаването на електрически ток през чернодробната тъкан. Самият хирургически инструмент е съставен от три материала с различни електрически и топлинни свойства.

Дискретизацията на модела с линейни конформни елементи (виж Фиг. 3) води до системи алгебрични уравнения с голяма размерност. За решаването на тези системи се използва паралелен алгоритъм, реализиращ метода на спрегнатия градиент с преобусловител — алгебричен мултигрид метод BoomerAMG. След дискретизацията по пространството е използвана чисто неявна схема за дискретизацията по времето. Фиг. 4 показва изчислената температура в областта след 8 минути въздействие с електрически ток с напрежение 10 V. Таблица 1 показва времената, необходими за решаване на задачата при различна разделителна способност.

Domain size	Proc.	Unknowns	Simulation time	Weak scaling
$256 \times 256 \times 256$	16	16 974 593	3301.07 s	
$322 \times 322 \times 322$	32	33 698 267	3663.99 s	90 %
$406 \times 406 \times 406$	64	67 419 143	4443.94 s	74 %
$512 \times 512 \times 512$	128	135 005 697	5235.53 s	63 %

Таблица 1: Време за изпълнение на паралелния алгоритъм при компютърна симулация на радио-честотна аблация на чернодробни тумори върху IBM Blue Gene/P.

1.4.1 Числена хомогенизация

Голяма част от изследванията по проекта са свързани с числена хомогенизация. Резултатите, публикувани в [14, 15, 16, 17, 18, 26] са получени при паралелна реализация на метода на спрегнатия градиент с преобусловител за решаване на системите частни диференциални уравнения, възникващи при числената хомогенизация на микроструктури на човешки кости. Разгледаните задачи представят силно хетерогенната структура на истински костни проби. Данните са получени чрез компютърна томография с висока резолюция. За дискретизация на разгледаната елиптична задача са използвани неконформни крайни елементи на Rannacher-Turek.

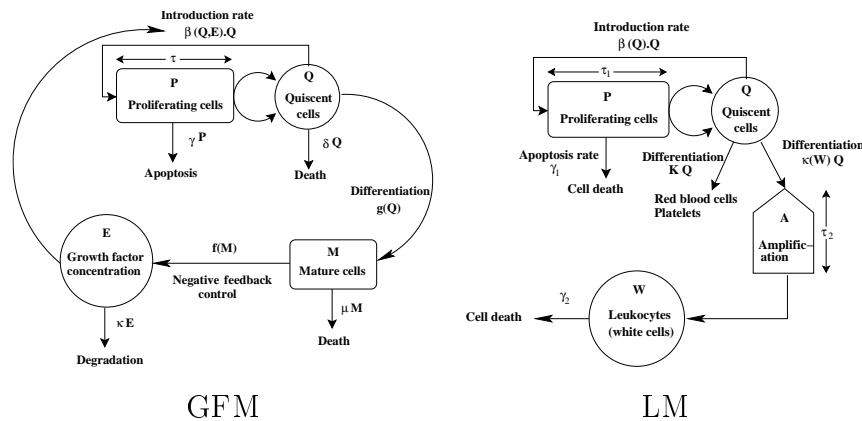
В [14, 15, 16, 26] е изследвана паралелната ефективност на метода на спрегнатия градиент с алгебричен мултигрид като преобусловител. За преобусловител е използван BoomerAMG алгоритъм. Проведени са числени експерименти върху IBM Blue Gene/P суперкомпютър за четири тестови задачи: костна микроструктура с размери $16 \times 16 \times 16$, $32 \times 32 \times 32$, $64 \times 64 \times 64$ и $128 \times 128 \times 128$ воксела. В [14] е изследвана скоростта на сходимост на итерационния метод в зависимост от коефициента на Поасон $\nu = 0.4, 0.4999, 0.499999$, като в последния слу-

чай флуидната фаза на костта може да бъде разглеждана като почти несвиваем материал. Получени са хомогенизираните коефициент на Поасон и модул на Юнг при пренебрегване на течната фаза. [16, 26] разглеждат решаването на еластичните задачи при коефициент на Поасон $\nu = 0.4, 0.49, 0.499, 0.4999, 0.49999$. В [15] хомогенизираните коефициенти са получени при разглеждане на течната фаза като почти несвиваем материал и е анализирано влиянието на флуидната фаза върху хомогенизираните коефициенти.

В [17, 18] като преобусловител за метода на спрегнатия градиент е използван MIC(0) — модифицирана непълна факторизация. Изследвана е паралелната реализация на метода на спрегнатия градиент. Проведени са числени експерименти върху Dell Pentium4 Xeon E5405 клъстер и IBM Blue Gene/P суперкомпютър за задачи, при които коефициента на Поасон е еднакъв за течната и твърдата фаза. Резултатите от числените експерименти показват, че паралелната ефективност върху използвания клъстер бързо намалява при увеличаване на броя на процесорите, но въпреки това времената за изпълнение върху клъстера са по-малки от тези върху суперкомпютъра тъй като Dell процесорите са много по-бързи от процесорите в суперкомпютъра на IBM. Резултатите от числената хомогенизация на костна микроструктура показват, че костната тъкан е анизотропна материя.

1.4.2 Компютърно моделиране на производство и регулация на кръвни клетки

Компютърно моделиране на възпроизводство и регулация на бели кръвни клетки. Динамиката на различни популации от бели кръвни клетки (Т-, В- и НК-клетки) е обект на наблюдение след трансплантация на стволови клетки, за да се проследи колко бързо се възстановява имунната система на пациента. Изследвани са два модела на лев-



Фигура 5: Модели на левкопоеза връзка между параметри и неизвестни копоеза: първият (GFM) с едно закъснение и отчитащ въздействието на растежни фактори, а вторият (LM) с две закъснения и отчитащ период на междинно диференциране на кръвните клетки (Фиг. 5). Параметрите участващи в моделите зависят от конкретния тип клетки и трябва да бъдат подходящо уточнени, за да бъде компютърният модел приложим за персонализирани приложения за диагностика и прогностика. Като първа стъпка в тази посока за двата модела е извършено следното: а) систематизиране на данните от медицинската практика, предоставени от НБАЛХЗ; б) изваждане на данни от статии за параметрите, които не могат да се измерят; в) числени експерименти с различни начални данни (конкретни пациенти) и стойности на параметрите и сравнение на резултатите от експериментите с данните за контролна група здрави пациенти. Направен е сравнителен анализ на резултатите, получени с всеки от моделите, който ще бъде използван като основа за анализ на чувствителността и настройка на участващите параметри. Първи резултати са публикувани в [7], а във втората част на [25] са изчистени забелязани неточности по отношение на размерностите на участващите величини.

Уравнения тип адвекция-дифузия-реакция (УАДР) за хемотактично движение на клетки. Първа стъпка на изследванията в това направление, е изучаване и анализ на съществуващи методи, алгоритми и софтуерни средства за числено решаване на УАДР. Моделът за хемотактично движение на хемопоеични стволони клетки не е стандартен, като включва ОДУ и ЧДУ и нелинейности както в системата уравнения, така и в граничните условия. Изследвани са методи за дискретизация и методи за разделяне на оператора за системи УАДР. Изучени са част от възможностите на пакета COMSOL Multiphysics за компютърно моделиране на физични процеси и за решаване на частни диференциални уравнения и са направени предварителни числени експерименти с изследвания модел. Резултати от тези експерименти са подготвени за публикуване в [25].

Също така са изучавани метода на крайните обеми за дискретизация на диференциални уравнения и на схемата на Черток и Курганов, осигуряваща положителност на решението на система, моделираща хемотактично движение с хомогенни гранични условия на Нойман. Схемата на Черток и Курганов е приложена за модела за миграция на хемопоеични стволони клетки, като са направени необходимите модификации, свързани с наличието в него на нехомогенни гранични условия на Нойман.

1.5 Компютърни модели на авангардни технологии

Използването на двумерната версия на Датски Ойлеров модел е разгледано в [13, 21]. Изследван е двумерен модел за адвекция-дифузия-химия в задачата за замърсяване на въздуха, който се описва от система частни диференциални уравнения. За численото решаване е използвано последователно разцепване по процеси. Химичната част е нелинейна и изисква най-много време. За нея са използвани 6 преки алгоритъма за решаване

на обикновени диференциални уравнения. Това води до много дълги редици от системи линейни алгебрични уравнения, затова решаващо е тези системи да бъдат решавани ефективно. Това е постигнато с прилагането на 4 различни алгоритми. Сравнението на времената за изчисление показва, че при подходящ избор на ефективен алгоритъм времето може да бъде намалено 30 пъти.

Реализиран е алгоритъм за числена хомогенизация на геокомпозитни структури. Задачата за намиране на хомогенизиращия тензор на коравина се свежда до решаването на 6 линейноеластични задачи с периодични гранични условия. Те се дискретизират с неконформни крайни елементи на Rannacher-Turek. За решаването на получените системи линейни уравнения е използван метод на спрегнатия градиент с преобуславяне. Като първа стъпка за преобуславянето им се използва разделяне по преместванията, а след това за приближаване на така получената блочнодиагонална матрица — вложена итерация с метод на спрегнатия градиент с преобусловител BoomerAMG. Бяха проведени числени експерименти за намиране на хомогенизиращия тензор на коравина за геокомпозит, съставен от въглища и полиуретан, с размери $0.07\text{m} \times 0.07\text{m} \times 0.08\text{m}$, за които е използван образ, получен от микрокомпютърна томография с размери $110 \times 110 \times 35$ воксела.

Компютърната симулация на електрохимичните процеси, протичащи в литиево-йонните батерии, е област от голям практически интерес. В [23] е разгледана крайно-елементна дискретизация на електрохимичните процеси в литиево-йонни батерии. Системата от диференциални уравнения е нелинейна и свързва концентрацията на литий и електрическият потенциал. Има два различни типа области: един за електролита и един за активните твърди частици в електрода. Системата е формулирана с различни мащаби за различните типове области. Областите могат да бъдат с много неравномерни форми, като електролита заема прост-

ранството вътре в порестия електрод. Материалните характеристики се различават с няколко порядъка и могат да бъдат нелинейни функции на концентрацията на литиеви йони и/или на електрическия потенциал. На границата между електролита и активните частици на електрода са наложени специални гранични условия. Променливите са прекъснати на тези граници и връзката е нелинейна, което прави директните итерационни методи неефективни. Формулиран е итерационен метод на Нютон за явна дискретизация с крайни обеми на свързаната система диференциални уравнения. Проведени са редица числени експерименти за различни типове конфигурации електролит/електрод и различни характеристики на материалите. Скоростта на сходимост на метода на Нютон зависи както от нелинейните свойства на материалите, така и от нелинейността на граничните условия.

1.6 Разпространение на резултатите и международно сътрудничество

Представените резултати са получени при активно международно сътрудничество с групи от водещи университети в областта на изчислителната математика от Австрия, Германия, Дания, Полша и САЩ. Резултатите върху паралелни изчислителни системи са получени благодарение на сътрудничеството с HLRS в университета в Щутгарт; Institute of Geonics, Чешка академия на науките; Department of Information Technology, университета в Упсала.

Темата на този договор е в едно от приоритетните направления на съвременната информатика, а именно „Високопроизводителни пресмятания и разпределени алгоритми“. Част от бъдещата работа по настоящия договор е свързана и със следните договори за съвместни научни изследвания: Department of Applied Analysis, Eötvös Loránd University

(„Ефективни числени методи и алгоритми за решаване на големи нелинейни задачи“); със секцията по приложна математика на Institute of Geonics, Academy of Sciences of Czech Republic, Ostrava („Микроструктурни и многонивови модели с приложения в биомеханиката и геониката“); Department of Information Technology и Department of Earth Sciences, университета в Упсала („Parallel computing in Geosciences“); Systems Research Institute, Polish Academy of Sciences („Паралелни и разпределени изчислителни приложения“).

1.6.1 Отражение върху учебната и педагогическа дейност

Една от целите на колектива бе не само получаване на научни резултати, а същевременно популяризиране на тези резултати сред студентите от 3-4 курс и от ОКС „Магистър“ и внедряване на прилаганите методи и техники в процеса на обучение с цел привличане на нови кадри към научна работа в областта на изчислителната математика. Благодарение и на настоящия проект участващите организации все повече се утвърдиха като добре функциониращи в тази област научни центрове, работещи в добро сътрудничество както помежду си, така и с други институти на БАН и поддържащи добри международни контакти и изяви. Не на последно място, проектът безспорно стимулира и учебната работа, като допринесе нейното ниво да се доближи до европейското. Заслужават да бъдат отбелязани следните факти от дейността на членовете на колектива:

- През 2008 г. излезе от печат книгата „Числени методи в електротехниката“ част I с автори А. Андреев и М. Рачева. Тя е предназначена основно за студентите от ОКС „Магистър“ на специалността „Електроенергетика и електрообзавеждане“, както и за инженерни кадри, ориентирани се към научни изследвания. Работата по проекта безспорно оказва влияние върху качеството и съдържанието

на учебника. Той вече служи като помагало в работата на дипломанти и докторанти, разработките на които използват методи от изчислителната математика.

- Закупената по договора техника стана основа за обновяване на досега съществуващата база и за създаване на специализирана лаборатория по „Приложение на изчислителната математика в инженерните изследвания“ към ТУ-Габрово. Тя служи за привличане на докторанти и млади учени за работа в областта на адаптивните алгоритми в МКЕ, като основата е поставена главно благодарение на финансирането по този проект.
- Подготвена за печат е книгата „Числени методи в електротехниката“ II част с автори А. Андреев и М. Рачева. Тя е предназначена основно за студентите от ОКС „Магистър“ на специалността „Електроенергетика и електрообзавеждане“, както и за инженерни кадри, ориентирани се към научни изследвания.
- От 2010 г. стартира едноименна нова учебна дисциплина „Числени методи в електротехниката“, която ще се изучава от студентите на ОКС „Магистър“ от специалността „Електроенергетика и електрообзавеждане“ и от редовни докторанти на ТУ-Габрово.

1.6.2 Организиране на конференции и семинари

Важен фактор за развитие на международното сътрудничество е организирането на работни срещи, международни семинари и конференции в България. Тези форуми дават възможност за непосредствени контакти и са особено важни за израстването на младите научни работници. Членовете на научния колектив са организатори на организираните в България конференции „Large-Scale Scientific Computations“, Созопол

2009, 2011. Тези научни прояви са още едно признание за възможностите и международния авторитет на българските учени, работещи в областта на научните пресмятания, и в частност на колектива по настоящия проект. Финансирането на този проект ще спомогне за утвърждаване на конференцията като традиционна. През отчетния период членовете на научния колектив организираха и следните семинари и работни срещи с международно участие: Bulgarian — Swedish Workshop “Numerical Methods and High Performance Computations — interplay and novel ideas”, ИПОИ-БАН, София, 17–18 февруари 2009; International Workshop on Advanced Numerical Methods and Applications, ТУ Габрово, 12 ноември 2009; Workshop „Суперкомпютърни приложения“, хотел „Абир“, Велинград, 19-21 март 2010 г.; специална сесия “Environmental modelling” на Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A’10, Боровец, 20–24 август 2010 г.

2 Списък на публикациите

Материали излезли от печат

- [1] J. Kraus, S. Margenov, *Robust Algebraic Multilevel Methods and Algorithms*, Radon Series on Computational and Applied Mathematics, **5**, de Gruyter, 2009, ISBN 978-3-11-019365-7, 246 p.
- [2] A. Andreev, M. Racheva, Non-Conforming Z-type FE for Fourth-Order Problems: Estimates and Application, Proceedings of 3rd Annual meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN:1313-3357 (2009), 7–10.

- [3] A. Andreev, M. Racheva, Finite elements with integral degrees of freedom, International Conference UNITECH'09, 20-21 Nov. 2009, Gabrovo, **3**, 480–484.
- [4] A. Andreev, M. Racheva, Acceleration of the Convergence for Interpolated Nonconforming Finite Elements, Proceedings of 4th Annual meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN:1313-3357 (2010), 1–5.
- [5] A. Andreev, M. Racheva, Acceleration of Convergence for Eigenpairs Approximated by Means of Non-conforming Finite Element Methods, *Large-Scale Scientific Computing*, I. Lirkov, S. Margenov, J. Waśniewski eds., *Lecture notes in computer science*, **5910**, Springer, (2010), 695–702.
- [6] A. Andreev, M. Racheva, Zienkiewicz-type Finite Element Applied to Fourth-order Problems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, **235**, (2010), 348–357.
- [7] G. Bencheva, How does Clinical Data Fit into Two Leukopoiesis Models?, Proceedings of 4th Annual meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN:1313-3357 (2010), 11–16.
- [8] P. Boyanova, S. Margenov, On AMLI Preconditioning of Graph-Laplacians: Properties of the Two-Level Method, Proceedings of 3rd Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN 1313-3357, (2009), 19–22
- [9] P. Boyanova, S. Margenov, Numerical Study of AMLI Methods for Weighted Graph-Laplacians, *Large-Scale Scientific Computing*, I. Lirkov, S. Margenov, J. Waśniewski eds., *Lecture notes in computer science*, **5910**, Springer, (2010), 84–91.

- [10] S. Fidanova, I. Lirkov, 3D protein structure prediction, *J. Analele Universitatii de Vest Timisoara, Seria Matematica-Informatica*, Vol. **XLVII** (2), ISSN 1224-970X, 2009, 33–46.
- [11] I. Georgiev, J. Kraus, S. Margenov, Multilevel Preconditioning of Crouzeix-Raviart 3D Pure Displacement Elasticity Problems, *Large-Scale Scientific Computing*, I. Lirkov, S. Margenov, J. Waśniewski eds., *Lecture notes in computer science*, **5910**, Springer, (2010), 100–107.
- [12] I. Georgiev, J. Kraus, S. Margenov, J. Schicho, Locally optimized MIC(0) preconditioning of Rannacher-Turek FEM systems, *Applied Numerical Mathematics*, **59**, (2009), 2402–2415.
- [13] K. Georgiev, Z. Zlatev, Notes on the Numerical Treatment of Sparse Matrices Arising in a Chemical Model, Proceedings of 4th Annual meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN:1313-3357 (2010), 39–44.
- [14] N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems, Proceedings of 4th Annual meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN:1313-3357 (2010), 93–98.
- [15] N. Kosturski, S. Margenov, Numerical Homogenization of Bone Microstructure, *Large-Scale Scientific Computing*, I. Lirkov, S. Margenov, J. Waśniewski eds., *Lecture notes in computer science*, **5910**, Springer. (2010), 140–147.
- [16] N. Kosturski, S. Margenov, Y. Vutov, Efficient Solution of μ FEM Elasticity Problems in the Case of Almost Incompressible Materials, Proceedings of 3rd Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN 1313-3357, (2009), 65–68.

- [17] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Paprzycki, M. Ganzha, Parallel Performance Evaluation of MIC(0) Preconditioning Algorithm for Voxel μ FE Simulation, *Parallel processing and applied mathematics*, Part II, R. Wyrzykowski, J. Dongarra, K. Karczewski, J. Waśniewski ed., *Lecture notes in computer science*, **6068**, Springer, 2010, 135–144.
- [18] S. Margenov, Y. Vutov, Parallel MIC(0) Preconditioning for Numerical Upscaling of Anisotropic Linear Elastic Materials, *Large-Scale Scientific Computing*, I. Lirkov, S. Margenov, J. Waśniewski eds., *Lecture notes in computer science*, **5910**, Springer, (2010), 805–812.
- [19] R. Sviercoski, S. Margenov, A Hybrid Multiscale Multigrid Approach by Incorporating Analytical Results, Proceedings of 4th Annual meeting of the Bulgarian Section of SIAM, Demetra, Sofia, ISSN:1313-3357 (2010), 111–116.

Материали приети за печат

- [20] A. Andreev, M. Racheva, Lower Bounds for Eigenvalues by Nonconforming FEM on Convex Domain, 2nd International conference on Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2010, C. Christov, M. Todorov eds. AIP Conference Proceedings.
- [21] K. Georgiev, Z. Zlatev, Specialized Sparse Matrices Solver in the Chemical Part of an Environmental Model, *Numerical Methods & Applications*, N. Kolkovska, I. Dimov, S. Dimova eds., *Lecture notes in computer science*, **6046**, Springer.
- [22] N. Kosturski, S. Margenov, Supercomputer Simulation of Radio-Frequency Hepatic Tumor Ablation, 2nd International conference on Ap-

lications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2010, C. Christov, M. Todorov eds. AIP Conference Proceedings.

- [23] P. Popov, Y. Vutov, S. Margenov, O. Iliev, Finite Volume Discretization of Equations Describing Nonlinear Diffusion in Li-Ion Batteries, *Numerical Methods and Applications*, N. Kolkovska, I. Dimov, S. Dimova eds., *Lecture notes in computer science*, **6046**, Springer.

Материали изпратени за печат

- [24] P. Boyanova, I. Georgiev, S. Margenov, L. Zikatanov, Multilevel Preconditioning of Graph-Laplacians: Polynomial Approximation of the Pivot Blocks Inverses, *Mathematics and Computers in Simulation*

Материали подготвени за печат

- [25] G. Bencheva, Towards computer modelling of the therapy of leukaemia
[26] N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems

Забележка: Според SCI Journal Citation Reports 2009 цитираните списания имат следния импакт-фактор:

Journal of Computational and Applied Mathematics	— 1.292
Applied Numerical Mathematics	— 1.279

Научни доклади на международни научни форуми

- G. Bencheva, Comparative Analysis of Solution Methods for Delay Differential Equations in Haematology, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009

- G. Bencheva, Real-Time Data-Driven Computer Simulation of Blood Cells Production and Regulation, International Workshop on Advanced Numerical Methods and Applications, Technical University Gabrovo, November 12, 2009
- G. Bencheva, How does clinical data fit into two leukopoiesis models?, 4-th Annual meeting of the Bulgarian section of SIAM, BGSIAM'09, IMI-BAS, Sofia, Bulgaria, Dec. 21–22, 2009
- G. Bencheva, Towards computer modelling the therapy of leukemia, First International Workshop on Mathematical Methods in Systems Biology, MMSB, Jan 4–7, 2010, Tel Aviv, Israel
- G. Bencheva, How does clinical data fit into two leukopoiesis models?, Work meeting in National Hospital for Active Treatment of Hematological Diseases, February 9, 2010
- G. Bencheva, Computer modelling of hematopoiesis with applications to blood pathologies, Group seminar on Applied analysis, Interdisciplinary Center for Scientific Computing, University of Heidelberg, March 9, 2010
- G. Bencheva, Computer modelling of hematopoiesis with applications to blood pathologies, Seminar on Mathematical Modelling, Master program “Computational mathematics and mathematical modelling”, FMI, Sofia University, April 21, 2010
- G. Bencheva, On the numerical solution of a chemotaxis system in haematology, Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A'10, August 20–24, 2010, Borovets, Bulgaria
- P. Boyanova, I. Georgiev, S. Margenov, L. Zikatanov, Multilevel Preconditioning of Graph-Laplacians: Polynomial Approximation of the

Pivot Blocks Inverses, Modelling 2009, Roznov pod Radhostem, Czech Republic, June 22–26, 2009

- P. Boyanova, S. Margenov, Numerical Study of AMLI Methods for Weighted Graph-Laplacians, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- P. Boyanova, S. Margenov, Optimal Order Multilevel Solvers in a Projection Scheme for Navier-Stokes Equations, Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A'10, August 20–24, 2010, Borovets, Bulgaria
- I. Georgiev, J. Kraus, S. Margenov, Multilevel Preconditioning of Crouzeix-Raviart 3D Pure Displacement Elasticity Problems, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- K. Georgiev, Comparison Results of Running of the Danish Eulerian Model (UniDEM) on Different Kind of Vector and Parallel Computers, Workshop on Numerical Methods and High Performance Computations — interplay and novel ideas, Sofia, February 17–18, 2009
- K. Georgiev, Z. Zlatev, Runs of UniDEM Model on IBM Blue Gene/P Computer and Analysis of the Model Performance, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- K. Georgiev, Comparison Results of Running of the Danish Eulerian Model for Long Range Transport of Air Pollutants on Different Kind of High-Performance Computer Architectures, 22nd workshop on tropospheric chemical transport modelling, Brescia, Italy, Nov. 26–27, 2009

- K. Georgiev, Z. Zlatev, Specialized Sparse Matrices Solver in the Chemical Part of an Environmental Model, Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A'10, August 20–24, 2010, Borovets, Bulgaria
- O. Iliev, S. Margenov, P. Popov, Y. Vutov, Finite Volume Discretization of Nonlinear Diffusion in Li-Ion Batteries, Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications (NM&A'10), August 20–24, 2010, Borovets, Bulgaria
- N. Kosturski, S. Margenov, Numerical Homogenization of Bone Microstructure, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems, Modelling 2009, Roznov pod Radhostem, Czech Republic, June 22–26, 2009
- N. Kosturski, Scalable PCG Solution Algorithms for μ FEM Elasticity Systems, Mathematics and Computers in Simulation, Annual Meeting of BGSIAM, Sofia, Dec. 21–22, 2009
- N. Kosturski, 3D FEM Analyses on Blue Gene/P of Radio-Frequency Hepatic Tumor Ablation, workshop on Supercomputer applications, March 19–21, 2010.
- I. Lirkov, Parallel Performance Evaluation of MIC(0) Preconditioning Algorithm for Voxel μ FE Simulation, 8th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, Wroclaw, September 13–16, 2009
- S. Margenov, Blue Gene in Bulgaria — Center of Excellences on Supercomputing Applications, Joint Project of IPP-BAS, SU, TU-Sofia and

MU-Sofia, Opening of the IBM Academic Initiative, Sofia, March 9, 2009

- S. Margenov, Parallel PCG algorithms for voxel FEM systems (invited talk), Complex HPC Meeting, Universidade Tecnica de Lisboa, Portugal, Oct. 19–20, 2009
- S. Margenov, Supercomputing: methods, algorithms and applications (plenary talk), Computer Science'09, Technical University – Sofia, Bulgaria, Nov. 5–6 2009
- S. Margenov, Y. Vutov, Parallel MIC(0) Preconditioning for Numerical Upscaling of Anisotropic Linear Elastic Materials, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- S. Petrova, On Shape Optimization of Acoustically Driven Microfluidic Biochips, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- S. Petrova, Applications of one-shot methods in PDEs constrained shape optimization, Mathematics and Computers in Simulation, ENUMATH 2009, Uppsala, Sweden, June 29–July 3, 2009
- P. Popov, Y. Efendiev, Y. Gorb, Multiscale Modeling and Simulation of Fluid Flows in Highly Deformable Porous Media, Seventh International Conference on Large Scale Scientific Computations, LSSC'09, Sozopol, June 4–8, 2009
- P. Popov, Y. Efendiev, Y. Gorb, Multiscale Modeling of Poroelasticity in Highly Deformable Fractured Reservoirs, Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A'10, August 20–24, 2010, Borovets, Bulgaria

- Y. Vutov, A Parallel MIC(0) Preconditioning Technique for Elliptic Problems, Bulgarian — Swedish Workshop “Numerical Methods and High Performance Computations — interplay and novel ideas”, IPP-BAS, Sofia, February 17–18, 2009
- Y. Vutov, Parallel MIC(0) Preconditioning for Numerical Upscaling of Anisotropic Linear Elasticity Materials, Minisymposium on HPC-driven Numerical Methods and Applications, ENUMATH 2009, Uppsala, Sweden, June 29-July 3, 2009