

**БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ**

**ИНСТИТУТ**

**ПО**

**ПАРАЛЕЛНА ОБРАБОТКА**

**НА ИНФОРМАЦИЯТА**

**Секция: “Паралелни алгоритми”**

**Научен отчет 2007**

**Януари, 2008 г.**

## **1. Връзка на научната проблематика на секцията с националните и международни приоритети**

Научното направление "**Информатика, комуникации, управление**" е едно от важните приоритетни направления за развитие на научните изследвания, както в Българската академия на науките, така в редица научни програми на Европейския съюз (пета, шеста и седма рамкова програма) и научния отдел на НАТО.

Основната научна и научно-приложна дейност на секция "**Паралелни алгоритми**" е в тази приоритетна проблематика и обхваща следните направления на съвременната информатика:

- Оптимални методи и алгоритми на изчислителната линейна алгебра, методи Монте Карло и паралелни алгоритми за тяхната реализация;
- Високопроизводителни методи и алгоритми за обработка на изображения. Фрактални методи за компресия на изображения;
- Теоретична информатика, изчислителна геометрия и топологична теория на графите и паралелни алгоритми за задачи на дискретната математика.
- Разработване на паралелни алгоритми за решаване на базови задачи на изчислителната математика и използването им при компютърното моделиране на важни задачи за опазване на околната среда и инженерната практика;
- Грид пресмятания и Грид приложения и др.

В секцията се разработват нови методи и алгоритми за решаване на големи задачи с използване на мощни съвременни компютри, като се изследват изчислителната сложност, ускорението и ефективността. Разработват се алгоритми за компютърно моделиране на далечен пренос на замърсители във въздуха, за задачи от квантовата физика, за задачи свързани с ядрени и космически изследвания, за задачи произтичащи от компютърното моделиране на нови лекарствени средства и други важни задачи от практиката и ежедневието.

## **2. Резултати от научната дейност през 2007 год.**

### ***2.1. Най-важни научни постижения***

#### ***2.1.1. Ефективни и бързо сходящи квази-Монте Карло алгоритми***

Получени са нови сериозни резултати в областта на квази-Монте Карло методите и алгоритми при използване на разбъркани (scrambled) редици и напълно равномерно разпределени (completely uniformly distributed) редици. Направено е теоретично и експериментално сравнение на разработените нови квази-Монте Карло алгоритми с разработените преди квази-Монте Карло алгоритми с използване на редици на Соболев и Холтън. За целта е използвана задачата за приближено решаване на елиптични гранични задачи чрез “блуждаене по кълба” и “блуждаене по границата на областта”. Разработен е и хибриден Монте Карло алгоритъм с използване на равномерно разпределени редици на Соболев и Холтън за задачата за симулация на квантов транспорт с приложено електрично поле в GaAs полупроводник. Основните резултати са публикувани в LNCS том 4310 и изданието от юбилейната 30 международна конференцията – MIPRO 2007.

### ***2.2. Най-важни научно–приложни постижения***

#### ***2.2.1. Компютърно проектиране на лекарства***

Във връзка с компютърно проектиране на лекарства са постигнати резултати в областта на предсказване на тримерната форма на протеини. Предложеният алгоритъм използва комбинация от няколко метода и включва оптимизация на броя на хидрофобните връзки и отделяне на подобните форми. По този начин се цели да се избегнат недостатъците на всеки един от тези методи и едновременно с това се достига по-голяма точност. Методите за оптимизация на хидрофобните връзки дават добри резултати само при къси протеини, докато подобните форми дават голямо отклонение ако не се отчита степента на хидрофобност на аминокиселините. При предложения метод протеина първо се представя в хидрофобно полярна форма (двоична), след което се отделят повтарящи се структури с малка дължина, към които се прилага оптимизация на хидрофобните връзки. Постигнатите резултати са описани в статия публикувана в Journal of

Bioautomation (S. Fidanova, *Near- Native Protein Structure Simulation*, J. of Bioautomation **Vol. 7.** (2007), 57 – 63).

### ***2.3. Научни и/или научно-приложни постижения в резултат от международно сътрудничество***

#### ***2.2.3. Паралелизация на адвекционно-дифузионно-химически модули в модел за изследване на далечен пренос на замърсители във въздуха***

На базата на сътрудничество с датски и унгарски колеги са създадени нови алгоритми за решаване на подсистемите на Датския Ойлеров модел за далечен пренос на замърсители във въздуха. Анализирани са проведените многобройни експерименти с този модел върху различни паралелни изчислителни системи, включително и в Грид среда. На базата на анализ и съпоставка на получените резултати са направени препоръки за използването на цитирания модел върху различни компютърни конфигурации (I. Farago, K. Georgiev, Z. Zlatev, *Parallelization of advection-diffusion-chemistry modules*, LNCS **4818**, Springer (to appear)).