

Резюмета на научните публикации,

с които доц. д-р Красимир Тодоров Георгиев участва в конкурса за заемане на академичната длъжност „професор” в област на висше образование 4. „Природни науки, математика и информатика“, професионално направление 4.5. „Математика“, научна специалност „Математическо моделиране и приложение на математиката (в екологията)“, обявен в ДВ бр. 49/21.06.2019 г. за нуждите на секция „Научни пресмятания“ в ИИКТ – БАН

В4. Научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science, Scopus, Zentralblatt, MathSciNet, ACM Digital Library, IEEE Xplore и AIS eLibrary) равностойни на хабилитационен труд

1. Konstantinos Liolios, Vassilios Tsihrintzis, Konstantinos Moutsopoulos, Ivan Georgiev, and Krassimir Georgiev, A Computational Approach for Remediation, Procedures in Horizontal Subsurface Flow Constructed Wetlands, LNCS 7116, pp. 299–306, 2012, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (SJR

Представен е изчислителен подход за моделиране на потока на подземните води и транспортирането и отстраняването на замърсители в порести среди. Акцентира се върху процедурите за рехабилитация в изградени в хоризонтални подземни влажни зони. За числовата процедура се използва компютърната програмна система MODFLOW. Прилага се приложение за симулиране на пилотни мащабни единици на хоризонтални подземни потоци, изградени и експериментално изследвани в Democritus University of Thrace, Xanthi, Greece. Ефектите от позиционирането за презареждане на входа и изхода на оптималното отстраняване на замърсители също са числено изследвани.

2. Liolios, K; Tsihrintzis, V; Georgiev, K; Georgiev, I, A Computational Investigation of the Optimal Reaction Type Concerning BOD Removal in Horizontal Subsurface Flow

Constructed Wetlands, Studies in Computational Intelligence, Vol: 648, Pages: 29-45, DOI: 10.1007/978-3-319-32207-0_3, 2016 (SJR)

Представена е числена симулация на отстраняване на биохимично потребление на кислород (БПК) във влажни зони на хоризонтални подпочвени потоци (HSF CW). Акцентира се върху избора на оптималния тип реакция, свързана с отстраняването на БПК. За тази цел се извършва изчислително проучване, като се сравняват най-обичайният тип реакция, от първи ред и наскоро предложенят тип Monod, който симулирани експериментални данни, получени експериментално от пет пилотни скали HSF CW. Тези експерименти се провеждат в продължение на две години в съоръженията на Laboratory of Ecological Engineering and Technology (LEET), Democritus University of Thrace (DUTh), Xanthi, Greece. За числената симулация се използва компютърния код *Visual MODFLOW* компютърен код и по-специално подпрограмата RT3D.

3. Liolios, K; Tsihrintzis, V; Angelidis, P; Georgiev, K; Georgiev, I, Numerical Simulation for Horizontal Subsurface Flow Constructed Wetlands: A Short Review Including Geothermal Effects and Solution Bounding in Biodegradation Procedures, AIP Conference Proceedings, Vol: 1773, Article Number: 110009, DOI: 10.1063/14965013, 2016 (SJR)

Разгледани са съвременни разработки за моделиране на потока на подземните води и транспортирането и замърсяването на замърсители в порестите среди на влажните зони от хоризонтални подпочвени потоци (HSF CWs). Накратко са представени двата най-често използвани инженерни подхода при решаване на задачи за опазване на околната среда, на „черната кутия“ и този базиран на симулация на съставните процеси. Анализирани са последни резултати от проучвания, получени с помощта на тези два подхода чрез съответни съдържателни примери за приложение, при които се набляга на оценката на оптималните параметри за проектиране и експлоатация по отношение на HSF CW. За подходът на черната кутия се обсъжда използването на изкуствени невронни мрежи за формулирането на модели, които прогнозира ефективността на отстраняване на HSF CWs. Представено е ново математическо доказателство, което се отнася до зависимостта на коефициентите от първи ред от температурата и времето на хидравлично действие. За метода, базиран на симулация на съставните процес, първо се разглежда един пример за приложение, който се отнася до процедурите за оценка на

оптималния диапазон от стойности за коефициента на отстраняване, в зависимост от температурата или времето на хидравлично действие. Тази оценка се основава на симулиране на наличните експериментални резултати на пилотни единици, проведени в Democritus University of Thrace, Xanthi, Greece. Освен това във втори пример е представено ново разширяване на системата от частни диференциални уравнения, за да се включат геотермалните ефекти. И накрая, в трети пример се разглежда случай на несигурност на параметрите по отношение на процедурите на биоразграждане и се използва един по-добър и нов подход, който се отнася до горната и долната граница на решението отнасящо се за практическото проектиране на HSF CWs.

4. Liolios, K; Tsihrintzis, V; Georgiev, K; Georgiev, I, Geothermal Effects for BOD Removal in Horizontal Subsurface Flow Constructed Wetlands: A Numerical Approach, Studies in Computational Intelligence, Vol: 681 Pages: 115-125, DOI: 10.1007/978-3-319-49544-6_10, 2017 (SJR)

Представен е опростен числен подход за едновременна симулация на потока на подземните води, транспортирането на геотермална енергия (топлина) и транспортирането на замърсители в плитки нерафинирани водоносни хоризонти. Акцентира се върху отстраняването на биохимичното потребление на кислород (БПК) във влажни зони на хоризонтални подпочвени потоци (HSF CW) при неизотермични условия. Благодарение на подходящо подобрени гранични и начални условия, математическата задача се записва като система частни диференциални уравнения (PDE), която система се „подава“ на компютърния код *Visual MODFLOW*. В числов пример, при който БПК се инжектира при въвеждане на геотермална вода, така получените изходни резултати от компютърната симулация се сравняват с наличните експериментални данни.

5. Liolios, K; Tsihrintzis, V; Angelidis, P; Georgiev, K; Georgiev, I, Total Phosphorus Removal in Horizontal Subsurface Flow Constructed Wetlands: A Computational Investigation for the Optimal Adsorption Model, Studies in Computational Intelligence, Vol: 728 Pages: 109-121, DOI: 10.1007/978-3-319-65530-7_11, 2018 (SJR)

Представена е числена симулация относно премахването на общия фосфор (TP) в влажните зони, изградени от хоризонтален подземен поток (HSF CWs). За изучаване и анализиране на абсорбцията се осъществява сравнение между резултатите от линеен и нелинеен модел. Целта е да се проучи кой от тези два адсорбционни модела е оптималният за изчислителна симулация на отстраняване на TP. Симулациите се отнасят за пет пилотни мащаба HSF CWs, които са конструирани и експлоатирани в съоръженията на Лабораторията по екологично инженерство и технологии (LEET) към Катедра по екологично инженерство на Democritus University of Thrace (DUTh), Xanthi, Greece. За числената симулация се използва компютърният код *Visual MODFLOW*, който се основава на метода на крайните разлики. Накрая се дава сравнение между изчислителните и наличните експериментални резултати.

Г7. Научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of Science, Scopus, Zentralblatt, MathSciNet, ACM Digital Library, IEEE Xplore и AIS eLibrary), извън публикациите по т. В4.

1. Antonov, A; Georgiev, K; Komsalova, E; Zlatev, Z, *Comparison of two local refinement methods for Large Scale Air Pollution simulations*, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 2907 Pages: 287-294, 2003 (IF, Q4)

Два метода за симулиране на големи модели за изследване на замърсяване на въздуха (LSAP) върху статични мрежи с локални сгъстявания се сравняват, като се използва обектно-ориентираната версия на Датския Ойлеров модел за изследване на далечен пренос на замърсители във въздуха. И двата метода се основават на метода на крайните елементи на Галеркин. Първият е над статична локално сгъстена решетка - наричаме я алгоритъм за статично локално сгъстяване (SLRA). Сравняваме SLRA с рекурсивния статично-сгъстяващ алгоритъм (RSRA), в който регулярните решетки с по-фина разделителна способност са вложени в по-груба „майчина“ мрежа. RSRA и SLRA се сравняват с тестовете на трансляционен и ротационен конус. Обсъждат се недостатъците и предимствата на методите.

2. Georgiev, K, On an Implementation of the TM5 Global Model on a Cluster of Workstations, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 4310, pp. 451–457, 2007 (IF, Q4)

TM5 е глобален химически модел за транспорт на елементи и частици във въздуха. Той позволява двустранно вложен мащабиране, което води до възможност за стартиране на модела върху сравнително много фина пространствена мрежа ($1^\circ \times 1^\circ$) над избрани области (Европа най-често се използва в представените експерименти, но Северна Америка, Африка и Азия могат се третираат отделно или в комбинации). Граничните условия за подобластите се получават последователно по вложеност от глобалния модел. Моделът TM5 е добро средство за изучаване на някои ефекти, дължащи се на локалното съгъстяване на мрежата върху проблемите на глобалната атмосферна химия (междуконтинентален транспорт на замърсители на въздуха и др.). Огромното увеличение на броя на многопроцесорните платформи и техните различия води до необходимост от различни подходи, за да се отговори на изискванията за оптималност на работата на компютъра. Тази статия е посветен на внедряване на паралелна версия на модела TM5 върху клъстер от SUN Workstations и на разработването на нов паралелен алгоритъм. Той се основава на разделянето, в известен смисъл, на изчислителната област, предполагайки, че вложените области са повече от една. Ако се приеме, че броят на вложените области е N , а броят на наличните процесори е p . Процесорите са разделени в N/p групи и всяка група е отговорна, както за цялата изчислителна област, така и за една от областите получени от локалното съгъстяване. Някои комуникации са необходими, за да се наложат условията на вътрешната граница. Новият алгоритъм има по-добри паралелни свойства от стария, който се използва във вътрешното ниво. Представени са някои резултати относно процесорното време, бързината и ефективността на новия алгоритъм.

3. I. Dimov, K. Georgiev, Tz. Ostromsky, Z. Zlatev, Computational challenges in the numerical treatment of large air pollution models, Ecological Modelling, 179 (2004)187 – 203, Elsevier, DOI: 10.1016/j.ecolmodel.2004.06.019, (IF, Q2)

Замърсяването на въздуха и по-специално намаляването на замърсяването на въздуха до някои приемливи нива е важен екологичен проблем, който ще стане още по-важен през

следващите 10-20 години. Този проблем може успешно да бъде проучен само когато се разработват и използват рутинно цялостни модели с висока разделителна способност. Такива модели обаче отнемат много време, дори когато могат да се използват съвременни високоскоростни компютри. В действителност, ако моделът за замърсяване на въздуха трябва да се приложи в голяма пространствена област чрез използване на мрежи, тогава дискретността му винаги ще доведе до огромни изчислителни проблеми. Да приемем например, че пространствената област е дискретизирана с помощта на мрежа (480 x 480) и че броят на химичните елементи, изследвани в модела, е 35. Тогава няколко системи от обикновени диференциални уравнения, съдържащи 8 064 000 уравнения, трябва да се решават на всяка стъпка по времето (броят на стъпките във времето обикновено е няколко хиляди). Ако се използва триизмерна версия на същия модел на замърсяване на въздуха, горната цифра трябва да се умножи по броя на слоевете във височина. Изключително трудно е да се атакуват такива големи изчислителни проблеми, дори когато се използват най-бързите компютри, които са налични в момента. Съществува допълнителна голяма трудност, която много често се подценява (или дори пренебрегва), когато големите пакети за приложения се преместват от последователни компютри към съвременни паралелни машини. Високоскоростните компютри обикновено имат много сложна архитектура на паметта и следователно задачата да създадат ефективен код за конкретния високоскоростен компютър, който е на разположение, е едновременно изключително трудна и много трудоемка. Използването на стандартни инструменти за паралелизация при решаването на скицираните по-горе проблеми е разгледано в този документ. Дадени са резултати, получени на различни видове паралелни компютри. Доказано е, че новите ефективни паралелни алгоритми ни позволяват да решаваме повече и по-големи проблеми.

4. Zlatev, Z; Georgiev, K, Treatment of large scientific problems: An introduction, Lecture Notes in Computer Science, Volume: 3732, Pages: 828-830, 2006 (IF, Q4)

Компютрите стават все по-бързи и по-бързи. Възможностите им да се справят с много големи масиви от данни непрекъснато се увеличават. Проблемите, които изискват много време за изчисляване и разчитат на използването на огромни файлове с входни данни, вече могат да бъдат третирани на мощни работни станции и персонални компютри (подобни проблеми трябваше да бъдат третирани на мощни мейнфрейми само преди 5-6 години). Следователно е необходимо да се отговори на следните два важни въпроса:

Дали компютрите, които са налични в момента, са достатъчно големи? Нуждаем ли се от по-големи (тук и в останалата част от това въведение „по-голям компютър“ означава компютър с по-големи дискове с памет, а не физически по-голям компютър) и по-бързи компютри за решаване на големите и свръхголеми научни проблеми, които се появяват в различни области на науката и техниката и трябва ли да бъдат решени сега или в близко бъдеще?

5. Georgiev, K; Kosturski, N; Margenov S, On the numerical solution of the heat transfer equation in the process of freeze drying, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 4818 Pages: 410-416, DOI: 10.1007/978-3-540-78827-0_46, 2008 (SJR)

Процесът на сушене чрез вакуумно замразяване се моделира от система от нелинейни частни диференциални уравнения. Тази статия е фокусирана върху подмодела на пренос на топлина и маса в абсорбиращата камера. Разгледано е численото третиране на свързаното параболично частно диференциално уравнение. Избраните числени резултати илюстрират специфичните тънкости на проблема, както и някои наскоро получени резултати. В края са дадени кратки заключителни бележки и перспективи за бъдещи изследвания.

6. Zlatev, Z; Ebel, A; Georgiev, K, Editorial: large-scale computations in environmental modelling, INTERNATIONAL JOURNAL OF ENVIRONMENT AND POLLUTION, Vol: 32 Issue: 2 Pages: 135-138, 2008 (IF, Q1)

Защитата на околната среда е един от най-важните проблеми, пред които е изправено модерното общество. Значението на този проблем постоянно нараства през последните три-четири десетилетия и опазването на околната среда става още по-важно през 21 век. Надеждни и стабилни стратегии за контрол за опазване на замърсяването причинени от вредни химични съединения под определени безопасни нива трябва да бъдат разработени и се използва рутинно. Големи математически модели, в които всички важни физическите и химичните процеси са адекватно описани, могат успешно да се използват за ефикасното решаване на тази изключително важна задача. Използването на големи и свръхголеми математически модели, в които всички важни физични и химични процеси са адекватно описани води след себе си прилагането на подходящи процедури

за дискретизация и разделяне по съставните физически процеси на огромните изчислителни задачи, които се получават. При типична симулация човек трябва да изпълни няколкостотин или даже няколко хиляди стъпки по времето. При всяка такава стъпка се решават числено поредица от системи от свързани обикновени диференциални уравнения съдържащи до няколко милиона уравнения.

7. Farago, I; Georgiev, K; Thomsen, P.G; Zlatev, Z, Numerical and computational issues related to applied mathematical modelling – Preface, APPLIED MATHEMATICAL MODELLING, Vol: 32 Issue: 8 Pages: 1475-1476, 2008, DOI: 10.1016/j.apm.2007.06.035 (IF, Q1)

Математическите модели са мощни инструменти, когато трябва да се изучават различни взаимоотношения в природата и в обществото. Ето защо такива модели се използват често в много области на науката и техниката. Аналитичните решения на математическите модели обикновено не са налични. Следователно математическите модели трябва да се третират числено на компютри. Компютрите стават все по-мощни. Това позволява на учените и инженерите да изградят все по-всеобхватни модели. Това означава, че разработването на по-мощни компютри стимулира учените и инженерите да разработят по-съвременни, по-сложни и по-всеобхватни математически модели.

8. Zlatev, Z; Ebel, A; Georgiev, K; Jose, RS, Large scale computations in environmental modelling: Editorial introduction, ECOLOGICAL MODELLING, Vol: 217 Issue: 3-4 Pages: 207-208, DOI: 10.1016/j.ecolmodel.2008.06.001, 2008 (IF, Q2)

Екологичните проблеми стават все по-важни за съвременното общество и тяхното значение ще със сигурност ще бъде увеличен в близко бъдеще. Високи нива на замърсяване (високи концентрации и/или високи отлагания на някои вредни вещества химически видове) може да причини щети на растения, животни и хората. Освен това някои екосистеми също могат да бъдат повредени (или дори унищожена), когато нивата на замърсяване станат много високо. Ето защо нивата на замърсяване трябва да бъдат внимателно изучени в усилията

- да се предвиди появата на високи нива на замърсяване, които може да причини различни щети в нашата среда и / или
- да реши какво трябва да се направи, за да се запази вредното концентрации и / или отлагания при предписани приемливи лимити.

9. Georgiev, K; Kosturski, N; Margenov, S; Stary, J, On adaptive time stepping for large-scale parabolic problems: Computer simulation of heat and mass transfer in vacuum freeze-drying, JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS, Vol: 226 Issue: 2, Pages: 268-274, DOI: 10.1016/j.cam.2008.08.020, 2009 (IF, Q1)

Представени са резултати от работа мотивирана от задачата за вакуумно - замразително сушене, който е процес на дехидратиране на замразени материали чрез сублимация под висок вакуум. По-конкретно, той се отнася до математическото моделиране и компютърното симулиране на топло- и масообмен, при което се изисква решаване на зависимо от времето нелинейно диференциално уравнение от параболичен тип.

Вместо равномерна дискретизация на разглеждания времеви интервал, се прилага адаптивна процедура за стъпка по времето, за да се оптимизира цялата симулация. Процедурата се основава на локалното сравнение на приближенията на методите на Кранк-Николсън и неявен Ойлер. Включени са резултатите от числени и компютърни експерименти, извършени върху предварително избрани задачи.

10. Georgiev, K; Zlatev, Z, Runs of UNI-DEM Model on IBM Blue Gene/P Computer and Analysis of the Model Performance, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 5910, Pages: 188 – 196, DOI: 10.1007/978-3-642-12535-5_21, 2010 (SJR)

UNI – DEM е унифицирана версия на един Ойлеров модел за изследване на транспорта на замърсители на дълги разстояния във въздуха. Изчислителната област на модела обхваща Европа и някои нейни съседни части от Атлантическия океан, Азия и Африка. Моделът основно е разработен в Националния институт за изследвания на околната среда на Дания, разположен в Роскилде. Когато UNI – DEM трябва да се прилага върху голяма пространствена област чрез използване на фини дискретни мрежи, тогава това води до огромни изчислителни задачи. Така например, ако пространствената област е

дискретизирана с помощта на мрежа (480 x 480) и броят на химичните елементи, изследвани по модела, е 35, тогава на всяка стъпка трябва да се решават няколко системи от обикновени диференциални уравнения, съдържащи 8 064 000 уравнения (броят на стъпките във времето обикновено е няколко хиляди). Ако се използва тримерна версия на същия модел на замърсяване на въздуха, тогава числото представено по-горе трябва да се умножи по броя на слоевете във височина. Това означава, че такъв модел като UNI – DEM трябва да се използва само на високоефективни компютърни архитектури, като IBM Blue Gene/P, например. Компютърната реализация на такъв сложен голям модел на всеки нов суперкомпютър е нетривиална задача. В тази статия е представен анализ на изпълненията на UNI – DEM, извършвани досега на компютъра IBM Blue Gene/P, и са обсъдени някои предварителни резултати по отношение на производителността, скоростите и ефективността.

11. Georgiev, K; Zlatev, Z, Studying an Eulerian Computer Model on Different High-performance Computer Platforms and Some Applications, AIP Conference Proceedings, Vol: 1301 Pages: 476-+, 2010 (SJR)

Датският Ойлеров модел (DEM) е един Ойлеров модел за изучаване на транспорта на замърсители на въздуха на големи разстояния. Първоначално моделът е разработен в Националния институт за изследвания на околната среда в Дания. Изчислителната област на модела обхваща Европа, а някои нейни съседни части принадлежащи към Атлантическия океан, Азия и Африка. Ако DEM моделът трябва да бъде приложен с помощта на фини мрежи, тогава това води до огромен изчислителен проблем. Това означава, че такъв модел като DEM трябва да се използва само в компютърни архитектури с висока производителност. Внедряването и настройката на такъв сложен мащабен модел на всеки различен компютър е нетривиална задача. В тази статия са представени получени от авторите сравнителни резултати на работа на този модел на различни видове суперкомпютри: *векторни* (CRAY C92A, Fujitsu и др.), *паралелни компютри с разпределена памет* (IBM SP, CRAY T3E, клъстери Beowulf, Macintosh G4 клъстери и др.), *паралелни компютри с обща памет* (SGI Origin, SUN и др.) и *паралелни компютри с две нива на паралелизъм* (IBM SMP, IBM BlueGene/P, клъстери от многопроцесорни възли и др.). Основната идея в паралелната версия на DEM е подходът за разделяне на основната изчислителна област на подобласти. Представени са резултати за ефективното използване на кеш паметта, в това число и на йерархичната кеш памет на

съвременните компютри, както и постигнатата производителност, повишаването на скоростта и ефективността. Паралелният код на DEM, създаден чрез използване на стандартна библиотека MPI, изглежда много преносим и показва добра ефективност и скалируемост на различни видове векторни и паралелни компютри. В края на статията накратко са дискутирани някои важни приложения.

12. Ganzha, M; Georgiev, K; Lirkov, I; Margenov, S; Paprzycki, M, Highly Parallel Alternating Directions Algorithm for Time Dependent Problems, AIP Conference Proceedings, Vol: 1404, DOI: 10.1063/1.3659922, 2011 (SJR)

В тази статия се разглежда зависещо от времето уравнение на Стокс върху краен интервал от време и върху равномерна правоъгълна мрежа, записано в термините на скорост и налягане. За решаването на тази задача е създаден нов паралелен алгоритъм, базиран на метода на разделяне по посоки (direction splitting approach). Уравнението на налягането се получава от изменената форма на уравнението за непрекъснатост, в която ограничението за несвиваемост се изразява в отрицателна норма, предизвикана от разделянето по посоки. Използваната схема в алгоритъма се състои от две части: (i) определяне на скоростта и (ii) корекция на налягането. Това е двунивова схема на Crank-Nicolson схема за интегриране по времето за дву- и тримерни параболични задачи, при които производната от втори ред по отношение на всяка от пространствените променливи се третира имплицитно, докато другата променлива се третира експлицитно на всяка под-стъпка по времето. За да се постигнат добри резултати от паралелния алгоритъм, решаването на задачата на Поасон за корекция на налягането се заменя с решаване последователност от едномерни елиптични задачи от втори ред във всяка от пространствените оси. Паралелният програмен код е реализиран с помощта на стандартните MPI функции и тестван на две модерни паралелни компютърни системи. Завършените паралелни тестове демонстрират добро ниво на паралелна ефективност и скалируемост на изследвания алгоритъм, базиран на метода на разделяне по направления.

13. Zlatev, Z; Dimov, I; Farago, I; Georgiev, K; Havasi, A; Ostromsky, T, Richardson Extrapolated Numerical Methods for Treatment of One-Dimensional Advection

Equations, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 6046 Pages: 198-+, 2011 (SJR)

Адвекционните уравнения са съществена част от много математически модели, възникващи в различни области на науката и техниката. Важно е да се третират такива уравнения с ефикасни числени схеми. Приложена е добре познатата схема на Crank-Nicolson. Показано е, че точността на изчислените резултати може да бъде подобрена, когато схемата Crank-Nicolson се комбинира с екстраполация на Richardson.

14. Georgiev, K; Zlatev, Specialized Sparse Matrices Solver in the Chemical Part of an Environmental Model, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 6046 Pages: 158-166, 2011 (SJR)

В тази статия е разгледан един двумерен модул на описващ процесите адвекция-дифузия-химия в големия модел за решаване на задачи възникващи от опазването на околната среда (Датски Ойлеров модел за изследване на транспортирането на замърсители на въздуха в голям мащаб - UNI-DEM). Модулът е описан математически чрез система от частни диференциални уравнения. За ефективното решаване на получаващата се система уравнения се използва метода за разделяне по физически процеси - Sequential splitting. Нелинейната химия е най-времеемката част по време на работа на компютърната реализация и се моделира посредством шест имплицитни алгоритми за решаване на обикновени диференциални уравнения. Това води до решаване на много дълги последователности от системи с линейни алгебрични уравнения. Важно е тези системи да се решават ефективно. Това се постига чрез прилагане на четири различни алгоритми, които са разработени, тествани и обсъдени.

15. Georgiev, K; Zlatev, Z, Studying air pollution levels in the Balkan Peninsula area by using an IBM Blue Gene/P computer, INTERNATIONAL JOURNAL OF ENVIRONMENT AND POLLUTION, Vol: 46 Issue: 1-2 Pages: 97-114, DOI: 10.1504/IJEP.2011.042611, 2011 (IF, Q4)

Унифицираният Датски Ойлеров Модел (UNI – DEM) е подходящ модел за изследване както на транспорта на замърсители във въздуха на дълги разстояния, така и на трансформациите в атмосферата на замърсители, които са потенциално вредни.

Математическият модел е разработен в Националния институт за опазване на околната среда на Дания (NERI, Roskilde, Denmark). Пространствената област на модел обхваща Европа и някои съседни части. Паралелният код на UNI – DEM е създаден с помощта на стандартната комуникационна библиотека за паралелни компютри с разпределена памет MPI. Той е високо преносим и се изпълнява много ефективно на различни видове паралелни компютри. Резултатите представени в тази статия са получени с използването на суперкомпютърът IBM Blue Gene/P.

16. Georgiev, K; Zlatev, Z, Ebel, A, Editorial, INTERNATIONAL JOURNAL OF ENVIRONMENT AND POLLUTION, Vol: 46 Issue: 1-2 Pages: 1-5, DOI: 10.1504/IJEP.2011.042611, 2011 (IF, Q4)

Контролът на нивата на замърсяване в силно развити региони на Европа, Източна Азия (на първо място, Китай и Япония) и Северна Америка е много предизвикателна задача за съвременното общество. Тази задача също е много важна или поне ще стане много важна за много други силно индустриализирани региони на света. Уместността му непрекъснато нараства през последните две до три десетилетия. Необходимостта от създаване на надеждни стратегии за контрол на нивата на замърсяване, за да се предотврати вредното въздействие върху растенията, животните и хората ще стане още по-значимо в бъдеще. Машабните екологични модели за изследване на вредните ефекти, които са причинени или могат да бъдат причинени от високи нива на замърсяване, могат успешно да се използват, когато са изпълнени няколко условия, за да се разработят стабилни и надеждни стратегии за контрол. В много случаи прилагането на модерни модели е единственото средство, чрез което могат да се изследват много важни физични и химични процеси. Влиянието на бъдещите климатични промени върху високите нива на замърсяване е един пример за ситуация, при която могат да се използват само модели. Разработването на съвременни моделиращи системи и дори в по-голяма степен усъвършенстваните приложения на такива системи в различни екологични проучвания се използват в много страни от изследователи от различни научни области. Проучвания и симулации, свързани с:

- внедряване и използване на асимилация на данни
- използване на усъвършенствани компютърни архитектури за обработка на системи за моделиране числено

- влияние на климатичните промени върху нивата на замърсяване
- вредни ефекти, причинени от аерозоли
- симулация на прах
- анализ на чувствителността
- горски пожари и др.

са основни теми на изследванията в областта на екологичното моделиране.

17. Georgiev, K; Zlatev, Z, Implementation of sparse matrix algorithms in an advection-diffusion-chemistry module, JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS, Vol: 236 Issue: 3 Pages: 342-353, DOI: 10.1016/j.cam.2011.07.026, 2011 (IF, Q2)

Разглежда се двумерен модул описващ процесите на адвекция-дифузия-химия на голямо мащабен модел за изследване на замърсяването на околната среда. Модулът е описан математически чрез система от частни диференциални уравнения. Приложено е разделяне на задачата по физически процеси, като е използвано така нареченото “последователното разделяне“. Нелинейната химия е най-отнемаща време и се обработва посредством шест имплицитни алгоритми за решаване на обикновени диференциални уравнения. Това води до решение на много дълги последователности на системи с линейни алгебрични уравнения. Важно е тези системи да се решават ефективно. Това се постига чрез прилагане на четири различни алгоритми. Числените резултати показват, че алгоритмите, базирани на техниката на преобуславяне на разреждени матрици и на един специално разработен от авторите алгоритъм за конкретния разглеждан проблем, се представят най-добре.

18. Zahari Zlatev, Ivan Dimov, Istvan Farago, Krassimir Georgiev, Agnes Havasi, and Tzvetan Ostrowsky, Solving Advection Equations by Applying the Crank-Nicolson Scheme Combined with the Richardson Extrapolation, Hindawi Publishing Corporation, International Journal of Differential Equations, Volume 2011, Article ID 520840, 16 pages, doi:10.1155/2011/520840

Адвекционните уравнения се появяват често в големите математически модели, възникващи в много области на науката и техниката. Схемата на Кранк-Никълсън може успешно да се използва при численото решаване на такива уравнения. Точността на численото решение понякога може да се увеличи значително чрез прилагане на екстраполация на Ричардсън. В тази статия са формулирани и доказани две теореми, свързани с точността на изчисленията. Полезността на комбинацията, състояща се от схемата на Кранк-Николсън и екстраполация на Ричардсън, е илюстрирана с числени примери.

19. Ostromsky, Tz; Georgiev, K; Zlatev, Z, An Efficient Highly Parallel Implementation of a Large Air Pollution Model on an IBM Blue Gene Supercomputer, AIP Conference Proceedings, Volume: 1487 Pages: 135-142 DOI: 10.1063/1.4758951, 2012 (SJR)

В тази статия е представена една ефективната стратегия за паралелизация на Унифицирания Датски Ойлеров модел (UNI-DEM) за пренос на замърсители във въздуха върху паралелни компютри с разпределена памет. Прилагаме подобрена стратегия за декомпозиция към пространствената област, за да получим повече паралелни задачи (базиращи на по-големия брой подобласти) с по-малко комуникации между тях (поради оптимизиране на припокриващата се област, когато се решава числено подзадачата за адвекция-дифузия). Този вид правоъгълно разделяне на блокове (с тенденция на квадратна форма) ни позволява не само да увеличим значително броя на потенциалните паралелни задачи, но и да намалим изискванията за локална памет за задача, което е критично за реализацията върху суперкомпютри с разпределената памет на по-фина резолюция/по-фини мрежи на UNI-DEM за някои паралелни системи и по-специално на компютърната суперплатформа IBM BlueGene/P. Показано е чрез компютърни експерименти, че новата ни паралелна реализация може да използва доста ефективно ресурсите на мощния суперкомпютър IBM BlueGene/P, най-големият в България, до пълния си капацитет. Показано е, че новият подход е изключително полезен в големите и изчислително скъпи числени експерименти, проведени за изчисляване на някои първоначални данни за анализ на чувствителността на Датския Ойлеров модел.

20. Georgiev, K; Zlatev, Z, Numerical Experiments with Applying Approximate LU-factorizations as Preconditioners for Solving SLAEs with Coefficient Matrices from the "Sparse Matrix Market", AIP Conference Proceedings, Vol: 1487, pp 104-111, 2012 (SJR)

Решаването на системи линейни алгебрични уравнения (СЛАУ) много често е най-времетоотнемашката част от изчислителния процес по време на решаването на оригиналните (първоначалните) задачи тъй като тези системи могат да бъдат много големи (съдържащи до много милиони уравнения). Следователно е важно да се изберат бързи, робастни и надеждни методи за решение на СЛАУ, когато съответните компютърни кодове трябва да се изпълняват на високопроизводителните съвременни компютри. Тъй като коефициентите матрици на системите обикновено са разреждени (т.е. повечето от елементите им са нули), първото изискване е да се използва ефективно тази разреденост. Това обаче обикновено не е достатъчно, когато системите са много големи. В тази статия се представят резултати на основата на конструирането на преобусловители с използване на приближена LU-факторизация и тяхното използване в усилията за по-нататъшно повишаване на ефективността на изчисленията. Представени са резултати от изчислените експерименти, основаващи се на подробни сравнения, получени чрез използване на десет добре известни метода за решаване на СЛАУ (директното елиминирание на Гаус и девет итеративни метода), когато коефициентите на матрицата са избрани от "Sparse Matrix Market". Повечето от методите са преобусловени алгоритми базирани на подпространствата на Крилов.

21. Krassimir Georgiev, Tzvetan Ostromsky, and Zahari Zlatev, New Parallel Implementation of an Air Pollution Computer Model – Performance Study on an IBM Blue Gene/P Computer, LNCS 7116, pp. 283–290, 2012, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (SJR)

Представена е нова паралелна версия на Датския Ойлеров модел за далечен транспорт на замърсители на въздуха над територията на Европа (UNI – DEM). Той се основава на разделянето на пространствената област както в посока на координатната ос Ox , така и в посока на координатната ос Oy . Този нов подход дава възможности за използване на голям брой процесори (или ядра) на компютъра IBM BlueGene / P. Новата версия на паралелния код на UNI – DEM е създадена чрез използване на стандартна библиотека

MPI. Тя е преносима и показва добра ефективност и скалируемост. Представени са резултати и анализ на производителността, скоростта и ефективността, постигнати в първите тестови изпитания на новия паралелен код с използване на суперкомпютъра IBM Blue Gene / P.

22. Zlatev, Z; Georgiev, K; Dimov, I, Influence of climatic changes on pollution levels in the Balkan Peninsula, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Volume: 65 Issue: 3 Pages: 544-562, DOI: 10.1016/j.camwa.2012.07.006, 2013 (IF, Q1)

В статията е представено направеното изследване на влиянието на бъдещите климатични промени върху някои високи нива на замърсяване, които могат да причинят щети върху растенията, животните и хората. Особено внимание е отделено на Балканският полуостров. Избрани са четири важни количества: (а) годишни концентрации, (б) АОТ40С (високите стойности на АОТ40С могат да причинят щети на растенията и на първо място на селскостопанските културите), (с) АОТ40F (високите стойности на АОТ40F могат да причинят щети върху горския дървесен фонд), (г) брой на „лошите дни“ (големия брой „лоши дни“ могат да причинят вреди на хора, страдащи от астматични заболявания).

Критичните нива за количествата от б), в) и г) се регулират от няколко директиви на Европейския парламент (виж например [Директива 2002/3/ ЕО на Европейския парламент и на Съвета на Европейския парламент от 12 Февруари 2002 г. относно количествата озона в атмосферата, Официален вестник на Европейските общности L67 (2002) 14–30]). Интересували сме се главно от случаите, когато предписаните в директивите критични стойности са надвишени.

Използван е усъвършенстван математически модел за изпълнение на четиринадесет сценария за период от шестнадесет години. Резултатите, получени в избраната област, Балканския полуостров, с някои от тези сценарии, се изучават внимателно. Основният извод е, че повишаването на температурата, самостоятелно или в комбинация с някои други фактори, води до значително увеличаване на някои нива на замърсяване, което може да стане опасно за околната среда.

23. Farago, I; Georgiev, K; Havasi, A; Zlatev, Z, Efficient numerical methods for scientific applications: Introduction, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 65 Issue: 3 Pages: 297-300, DOI: 10.1016/j.camwa.2013.01.001, 2013 (IF, Q1)

Големите и свръхголеми математически модели се използват широко в съвременната компютърна епоха за решаване на много сложни проблеми, възникващи в различни области на науката и техниката. Тези модели обикновено се описват от зависими от времето системи частни диференциални уравнения (ЧДУ).

Дискретизирането по пространствените производни в тези системи ЧДУ води до огромни системи от обикновени диференциални уравнения (ОДУ), които обикновено се решават числено стъпка по стъпка. Броят на стъпките може да е огромен. Освен това много често системите на ОДУ са твърди, което предполага използването на неявни числени методи.

Ако се приложи имплицитен метод за решаване на линейни системи ОДУ, тогава една или няколко системи от линейни алгебрични уравнения (броят на тези системи зависи от конкретния имплицитен метод за решаване на твърди системи на ОДУ, който е избран) трябва да се решават на всяка стъпка по времето. Ако системата на ОДУ е нелинейна, то на всяка стъпка по времето трябва да се решават поредица от нелинейни задачи. Обикновено това става чрез прилагане на някои квази итеративен метод на Нютон и отново предполага, по време на всеки етап на итерацията, решението на системи линейни алгебрични уравнения. Трябва също да се подчертае, че математическите модели обикновено се изпълняват (а) много пъти, (б) на дълги времеви интервали и (в) с различни сценарии.

Представения кратък анализ много ясно показва четирите основни числени задачи, които трябва да се решават по време на изследването посредством съответни математически модели.

24. Zlatev, Z; Georgiev, K, Applying approximate LU-factorizations as preconditioners in eight iterative methods for solving systems of linear algebraic equations, CENTRAL EUROPEAN JOURNAL OF MATHEMATICS, Vol: 11 Issue: 8 Pages: 1510-1530, DOI: 10.2478/s11533-013-0248-2 (IF, Q3)

Времената за решаване на много проблеми, възникващи в различни области на науката и техниката, могат да бъдат намалени чрез прилагане на подходяща дискретизация, или към съответната система от линейни алгебрични уравнения, или към последователност от такива системи. Решението на система от линейни алгебрични уравнения много често е тази, която консумира голяма част от времето при изпълнението на съответния компютърен код. Основната причина е, че тези системи могат да бъдат много големи (съдържащи много милиони уравнения). Ето защо е важно да се изберат бързи, робастни и надеждни методи за тяхното решение, дори и в случаите, когато се използват бързи съвременни компютри. Тъй като коефициентите матрици на системите обикновено са разреждени (т.е. повечето от елементите им са нули), първото изискване е ефективно да се използва разреждаността. Това обаче обикновено не е достатъчно, когато системите са много големи. В тази статия се изследват и конструират подходящи преобусловители на основа на приближена LU-факторизация и тяхното използване в усилията за по-нататъшно повишаване на ефективността на изчисленията. Представени са и са анализирани резултати от направените подробни сравнения на многобройни числени експерименти, получени чрез използване на десет добре известни метода за решаване на системи от линейни алгебрични уравнения (Гаусова директноа елиминация и девет итерационни метода). Повечето от разглежданите методи са преобусловени алгоритми върху подпространства на Крилов.

25. Zlatev, Z; Georgiev, K; Dimov, I, Stability Properties of Explicit Runge-Kutta Methods Combined with Richardson Extrapolation, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 8353 Pages: 428-435, DOI: 10.1007/978-3-662-43880-0_49, 2014 (SJR)

Разгледани са няколко метода на Runge-Kutta от ред p с m стъпки, $m = 1, 2, 3, 4$. Предполага се, че $p = m$ и допълнително се използва екстраполация на Ричардсън. Доказано е, че не само комбинациите от екстраполация на Ричардсън с предварително избраните методи на Runge-Kutta са по-точни от основните числени методи, но и техните области на абсолютна стабилност са значително по-големи. Понякога този факт ни позволява да прилагаме по-големи стъпки по време на численото решение, когато се използва екстраполация на Ричардсън. Възможността за постигане на такъв положителен ефект се проверява чрез числени експерименти, проведени с внимателно подбран пример. Изтъква се, че прилагането на екстраполация на Ричардсън заедно с неявните методи на

Runge-Kutta може да бъде полезно, когато някои големи математически модели, включително модели, възникнали в изследването на замърсяване на въздуха, се решават числено.

26. Georgiev, K; Kosturski, N; Vutov, Y, On the Adaptive Time-Stepping in Radio-Frequency Liver Ablation Simulation: Some Preliminary Results, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 8353, Pages: 397-404, DOI: 10.1007/978-3-662-43880-0_45, 2014 (SJR)

Радиочестотната аблация е слабо инвазивна техника за лечение на чернодробни тумори. В тази статия са представени резултати, които се отнасят до математическото моделиране и компютърната симулация на процеса на пренос на топлина. В основата на изследванията е решаването на частно диференциалното уравнение от параболичен тип. Вместо равномерна дискретизация на разглеждания времеви интервал, се прилага адаптивна процедура по времето, за да се намали времето за симулация. Процедурата се основава на локалното сравнение на приближенията получени по метода на Crank Nicholson и тези, получени с използване на неявен метод на Ойлер. Представят се и се обсъждат резултатите от някои предварителни числени експерименти, извършени върху избрани тестови проблеми.

27. Zlatev, Z; Georgiev, K; Dimov, I, Studying absolute stability properties of the Richardson Extrapolation combined with explicit Runge-Kutta methods, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 67, Issue: 12 Pages: 2294-2307, DOI: 10.1016/j.camwa.2014.02.025, 2014 (IF, Q1)

Разгледани са явните методи на Runge – Kutta. Приема се, че броят на етапи m , $m = 1, 2, 3, 4$, е равен на реда p на избрания метод. Представени са резултати от влиянието на прилагането на екстраполацията на Ричардсън върху областта на абсолютна устойчивост на метода. Досега екстраполацията на Ричардсън се използваше само за увеличаване точността на числените приближения или с цел да се запазят изчислителните грешки под някои предварително предписани нива. Тук се изследва абсолютната стабилност на екстраполацията на Ричардсън във връзка с няколко числени метода. Показано е, че не само комбинациите от екстраполация на Ричардсън с явни методи на Runge-Kutta са по-

точни от основните числени методи, но и техните области на абсолютна устойчивост са по-големи. Това означава, че по-големи стъпки могат да бъдат използвани по време на интегрирането, когато се използва екстраполация на Ричардсън. Валидността на теоретичните резултати се потвърждава от числени експерименти с три внимателно подбрани примера. Изтъква се, че прилагането на екстраполация на Ричардсън заедно с явните методи на Runge-Kutta може да бъде полезно, когато някои големи и свръхголеми математически модели, описани от системи с частни диференциални уравнения, се изследват числено.

28. Zlatev, Z; Dimov, I; Farago, I; Georgiev, K; Havasi, A; Ostromsky, T, Application of Richardson extrapolation for multi-dimensional advection equations, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 67 Issue: 12 Pages: 2279-2293, DOI: 10.1016/j.camwa.2014.02.028, 2014 (IF, Q1)

В числовото решение на многомерните адвекционни уравнения се използва схема от тип Кранк–Никълсън, която е от порядък две по отношение на всички независими променливи. Обикновено редът на точност на която и да е числова схема може да бъде увеличен с едно, когато се използва добре известната екстраполация на Ричардсън. Доказано е, че в този конкретен случай редът на точност на комбинирания числен метод, методът, състоящ се от схемата на Кранк-Никълсън и екстраполация на Ричардсън, не е три, а четири.

29. Farago, I; Georgiev, K; Havasi, A; Zlatev, Z, Efficient algorithms for large scale scientific computations: Introduction, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 67 Issue: 12 Pages: 2085-2087, DOI: 10.1016/j.camwa.2014.05.021, 2014 (IF, Q1)

Проблемите с изграждането на ефективни алгоритми за големи и свръхголеми научни изчисления стават все по-важни, когато се използват съвременни високопроизводителни компютри. Показано е, че една от важните теми е ефективното използване на методите на крайните елементи, прилагани при дискретизацията на няколко типа PDE или системи от PDE. Други важни теми включват итеративни методи за решаване на големи системи от линейни алгебрични уравнения, възникващи след дискретизация на елиптични PDE, прилагане на схеми с краен обем за изследване на дисперсията на частиците в отворен

канал, алгоритми за прилагане на данни от наблюдения в опит да се подобри качеството от изчислените резултати от математическите модели, обработка на модели на дифузия и реакции за изследване на екосистеми, съставени от един хищник и две популации от плячка, и ефективно прилагане на процедурите за разделяне на подзадачи по физическите процеси.

30. Liolios, Angelos; Elenas, A; Liolios, A; Radev, S; Georgiev, K; Georgiev, I, Tall RC Buildings Environmentally Degradated and Strengthened by Cables Under Multiple Earthquakes: A Numerical Approach, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 8962 Pages: 187-195, DOI: 10.1007/978-3-319-15585-2_21, 2015 (SJR)

Представено е числено проучване с приложения при сеизмичния анализ на високи стоманобетонни и (RC) строителни конструкции, които са разградени поради екстремни екологични действия и са подсилени от кабелни елементи. Изчисляват се ефектите от множество земетресения върху такива сградни рамки на RC. Индексите на щетите се оценяват, за да се сравни сеизмичната реакция на конструкциите преди и след модернизиранието чрез укрепване на кабелните елементи и така да се избере оптималната версия на укрепване.

31. Zlatev, Z; Georgiev, K; Dimov, I, Selecting Explicit Runge-Kutta Methods with Improved Stability Properties, Lecture Notes in Computer Science, Vol: 9374 Pages: 409-416, DOI: 10.1007/978-3-319-26520-9_4, 2015 (SJR)

Явните (експлицитни) методи на Runge-Kutta могат ефективно да се използват при численото решаване на задачи с начално условие за не-твърди системи на обикновени диференциални уравнения (ОДУ). Нека m и p са броят на стъпките и редът на даден явен метод Runge-Kutta. В предишна наша статия (виж: Zlatev, Z., Georgiev, K., Dimov, I.: Improving the absolute stability properties of some explicit Runge-Kutta methods and their combinations with Richardson extrapolation, talk presented at the NM&A14 conference in Borovets, Bulgaria, August 2014) доказахме, че комбинацията от всеки явен метод на Runge-Kutta с $m = p$ и екстраполация на Ричардсън винаги води до значително подобряване на свойствата на абсолютната стабилност (устойчивост). Показахме, също така, че областите на абсолютна стабилност могат да бъдат допълнително увеличени,

когато се предположи, че $p < m$. За два конкретни случая, $p = 3 \wedge m = 4$ и $p = 4 \wedge m = 6$, е доказано, че

а) областите за абсолютна стабилност на новите методи са по-големи от тези на съответните явни методи на Runge-Kutta с $p = m$, и

(б) тези области стават много по-големи, когато допълнително се прилага екстраполация на Ричардсън.

Явните методи на Runge-Kutta, които имат оптимални области на абсолютна стабилност, образуват два големи класа от числови алгоритми (всеки член на всеки от тези класове има същата област на абсолютна стабилност като всички останали). Значително по сложни условия трябва да се извлекат, за да се получат подобни резултати в тези два класа.

В тази статия са представени резултати за два конкретни метода в тези два класа и проведените изчислителни тестове, като са използвани подходящи подобрени примери

32. Ganzha, Maria; Georgiev, K; Lirkov, I; Paprzycki, M., An application of partition method for solving 3D Stokes equation, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 70 Issue: 11 Pages: 2762-2772, DOI: 10.1016/j.camwa.2015.04.025, 2015 (IF, Q1)

В предишната работа на същия колектив е изследвана работата на паралелен алгоритъм, основан на подхода за разделяне по направления (direction splitting), за решаване на уравнението на Стокс, зависещо от времето. Използваме правоъгълна равномерна мрежа, комбинирана с апроксимация с централни разлики на вторите производни. Следователно, предлаганият алгоритъм изисква само решение на тридиагонални линейни системи.

В тази работа създаваме версия насочена към изпълнение върху масивно паралелни компютри, както и върху кълстери от многоядрени възли. Донякъде по-бавната (експериментално установена) ефективност на предложения подход се наблюдава при използване на всички ядра в един възел на съответния кълстер. За да отстраним този проблем, се опитахме да използваме подпрограмите LAPACK от библиотеката на многонишковите слоеве (multi-threaded layer library), но паралелната производителност на

компютърния код (въпреки направените подобрения) все още не беше задоволителна за единичен (многоядрен) възел.

В тази статия се разглежда хибридна паралелизация, базирана на стандартите MPI (за паралелни компютри с разпределена памет) и OpenMP (за паралелни компютри с обща памет). Мотивацията за това произтича от необходимостта да се постигне максимална паралелна ефективност на изпълнението на предложения алгоритъм. Съществените подобрения на паралелния алгоритъм се постигат чрез въвеждане на две нива на паралелизъм: (i) паралелизъм между възли на базата на MPI и (ii) паралелизъм вътре в възела, базиран на OpenMP. Реализацията е тествана на Linux клъстери с процесори на Intel и на суперкомпютър на IBM.

33. Liolios, Angelos; Karabinis, A; Liolios, A; Radev, S.; Georgiev, K; Georgiev, I, A computational approach for the seismic damage response under multiple earthquakes excitations of adjacent RC structures strengthened by ties, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 70 Issue: 11 Pages: 2742-2751, DOI: 10.1016/j.camwa.2015.08.012, 2015 (IF, Q1)

Тази статия е посветена на изследвания свързани със сеизмично укрепване на системите за гражданско строителство на съседни стоманобетонни конструкции (RC), които са били деградирани от околната среда, посредством кабелни елементи (връзки). Представен е числен подход за оценка на въздействието на удряне (сеизмично взаимодействие) върху реакцията на такива съседни структури при възбуждане на множество земетресения. За системата на управляващите частни диференциални уравнения (PDE) се използва двойна дискретизация, в пространството по метода на крайните елементи и във времето чрез директен инкрементален подход. Едностраничното поведение както на кабелните елементи, така и на ограниченията на интерфейса за контакт, стриктно се вземат предвид и водят до конститутивни условия на неравенство. И така, във всяка стъпка във времето се решава не-изпъкнал проблем с линейно допълване (a non-convex linear complementarity problem). Решението за оптималната схема за укрепване на кабелните елементи се получава въз основа на изчислени индекси за нанесени щети (damage indices). Установено е, че удрянето и укрепването на кабелите оказват значително влияние върху реакцията на земетресението и, следователно, върху

обновяването на съществуващите съседни RC структури с цел по-голяма устойчивост при сеизмични въздействия.

34. Georgiev, K; Piiev, O; Minev, P, Numerical Methods for Scientific Computations and Advanced Applications, COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, Vol: 70 Issue: 11 Pages: 2619-2620, DOI: 10.1016/j.camwa.2015.11.004, 2015 (IF, Q1)

Представени са някои бележки относно връзките между съвременните научни изчисления и числения анализ. През последните шестдесет години Научните пресмятания се превърнаха в много важен и универсален подход за научни изследвания във всички клонове на науката, инженерството, медицината и дори хуманитарните науки, главно защото:

- те са сравнително евтини и ефективни в сравнение с физическите експерименти;
- могат да осигурят реалистични симулации на дори по-сложни системи от тези, които могат да бъдат изучавани експериментално;;
- дават възможност да се осигурят реалистични симулации на дори по-сложни системи са отлично средство за конструиране на нови и подобряване на съществуващите теории и модели.

Съвременните научни пресмятания се измежду най-ярките примери за наистина интердисциплинарна област, включваща математика, компютърни науки, инженерство, физика, химия, медицина и др. Освен това този основен инструмент за изследвания ни позволява да използваме огромните изчислителни ресурси на съвременните и бъдещите компютърни системи с висока производителност.

Средствата използвани в научните пресмятания обикновено се основават на математически модели и съответните компютърни кодове, които се използват за извършване на виртуални експерименти за получаване на нови данни или за по-добро разбиране на съществуващите експериментални резултати. Те са особено важни в ситуации, когато цената на експериментите или тяхната сложност е прекомерно висока. Например, в много случаи е практически невъзможно да се извършват ин витро експерименти с живи организми или е изключително скъпо да се проверят експериментално всички възможни сценарии за потока, динамичното или

електромагнитно натоварване на съвременен самолет. Затова числените симулации революционизираха развитието в такива области през последните години.

Числения анализ е един от основните инструменти, използвани в научните пресмятания.. При него се разработват и анализират числени методи за дискретизация на непрекъснати модели и последващото им решение, както и за апроксимация на дискретни данни, като: интерполация на данни и екстраполация, методи за решаване на линейни и нелинейни системи от алгебрични уравнения (директни и итерационни методи, екстраполация на данни, многонивови и мрежови методи и др.), методи за решаване на системи от обикновени и частни диференциални уравнения (крайни разлика, крайни елементи и методи на крайните обеми и др.), методи за решаване на интегрални уравнения и задачи за оптимизация.

Друг важен елемент на научните пресмятания е прилагането на разработените числени методи и съответните им компютърни кодове върху многобройните компютърни системи, които са достъпни в днешно време. Едно съвременно и важно развитие в тази насока е използването на паралелни компютърни системи с обща и разпределена памет, както и графични процесори, което позволява наистина мащабни научни изчисления.

35. Liolios, Angelos; Moropoulou, A; Liolios, A; Georgiev, K; Georgiev, I, A Computational Approach for the Seismic Sequences Induced Response of Cultural Heritage Structures Upgraded by Ties, Studies in Computational Intelligence, Vol: 648 Pages: 47-58, DOI: 10.1007/978-3-319-32207-0_4, 2016 (SJR)

В тази статия са представени резултати от пресмятания и анализ на сеизмичното обновяване на сгради обявени за културно наследство при възбуждане на множество земетресения, като се използват материали и методи в контекста на устойчивото строителство. Представен е числен подход за сеизмичната реакция на индустриалните сгради на културното наследство от стоманобетон (RC), които са сеизмично подсилени чрез използване на кабелни елементи (напрежения). За системата на управляващите частни диференциални уравнения (PDE) се използва двойно дискретизиране в пространството по метода на крайните елементи и във времето чрез инкрементален подход. Едностраничното поведение на кабелните елементи, както и другите нелинейности на RC рамковите елементи, са взети под внимание и водят до условия с неравенства. Неизпъкналият линеен проблем се решава на всеки етап, като се използват методи за

оптимизация. Сеизмичната оценка на структурата на RC и решението за оптимална схема за укрепване на кабелните елементи се получават въз основа на изчислени индекси за щетите.

36. Zahari Zlatev, Ivan Dimov, Krassimir Georgiev, Relations between Climatic Changes and High Pollution Levels in Bulgaria, Open Journal of Applied Sciences, 2016, 6, 386-401, Published Online July 2016 in SciRes. <http://www.scirp.org/journal/ojapps>, <http://dx.doi.org/10.4236/ojapps.2016.67040>

Едно от важните последствия от климатичните промени е потенциалната опасност от увеличаване на концентрациите на някои замърсители, което може да причини щети на хората, животните и растенията. Затова си струва внимателно да се проучи влиянието на бъдещите климатични промени върху високите нива на замърсяване. Основната тема на изследванията представени в тази статия е увеличаването на някои нива на озон в България, но също така се обсъждат няколко свързани с това теми. Специфичният математически инструмент, приложен в това проучване, е голям математически модел на замърсяване на въздуха, Използван е унифицираният Датски Ойлеров модел (UNI-DEM), който успешно се използва в няколко проучвания, свързани с потенциално опасни нива на замърсяване в няколко европейски страни. Този модел се описва от нелинейна система от частни диференциални уравнения, която се решава числено чрез използване на (а) усъвършенствани числени алгоритми и (б) съвременни компютърни архитектури. Освен това (в) кодът е паралелен и (г) кеш паметта на наличните компютри се използва ефективно. Показано е, че в България, както и в другите европейски страни, климатичните промени ще доведат до постоянно увеличаване на някои количества, свързани с озоновото замърсяване. Важният въпрос е, че в нашето проучване промените в нивата на опасно замърсяване се следват от година на година. По този начин се прави опит да се улови ефектът на между годишните изменения на метеорологичните условия върху нивата на концентрациите на озон и да се проследи пряко влиянието на климатичните промени върху нивата на замърсяване. Освен това се обсъжда и чувствителността на нивата на замърсяване към вариациите на човешките (антропогенни) и естествени (биогенни) емисии.

37. Blaheta, R; Georgiev, I; Georgiev, K; Jakl, O; Kohut, R; Margenov, S; Stary, J, High Performance Computing in Micromechanics with an Application, CYBERNETICS AND INFORMATION TECHNOLOGIES, Vol: 17 Issue: 5 Pages: 5-16, DOI: 10.1515/cait-2017-0050, 2017 (SJR)

Високопроизводителните изчисления (HPC) са необходими за много важни приложения в химията, изчислителната динамика на флуидите и др., Вижте, например, обзора представен в: Mihajlov i c, M., et al. Applications for Ultrascale Computing, International Journal Supercomputing Frontiers and Innovations, Vol. 2, 2015, с. 19-48. В настоящата статия накратко описваме приложение (проблем с многомащабния дизайн на материала), което изисква високопроизводителни пресмятания поради няколко причини. В частност, ние сме се концентрирали върху изследване и анализ на fibre-reinforced concrete и се фокусираме върху моделирането на твърдостта чрез числена хомогенизация и изчисляване на свойствата на локалния материал чрез решаване на обратни задачи. Решаването на възникващите изчислителни задачи изискват многократно решаване на свръхголеми задачи с до 200 милиона степени свобода и и това налага използването на съвременни високопроизводителни компютърни архитектури.

38. Zlatev, Z; Dimov, I; Farago, I; Georgiev, K; Havasi, A, Stability of the Richardson Extrapolation combined with some implicit Runge-Kutta methods, JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS, Vol: 310 Pages: 224-240, DOI: 10.1016/j.cam.2016.03.018, 2017 (IF, Q1)

Използването на екстраполация на Ричардсън в комбинация с различни числени методи за решаване на системи от обикновени диференциални уравнения (ОДУ) е сравнително просто, но важно изискване за стабилност на изчислителния процес и може да причини сериозни затруднения. Например, често използваното от учените в инженерите науки трапецовидно правило има добри свойства за стабилност, но комбинацията му с екстраполация на Ричардсън е нестабилна. Следователно е необходимо да се проучи предварително и много внимателно стабилността на новите числени методи, възникващи, когато учените и инженерите използват този изчислителен подход в комбинация с различни алгоритми за решаване на системи от ОДУ. В тази статия представяме едно систематично проучване на прилагането на екстраполация на Ричардсън за два непряки метода на Рунге-Кута. Представени са три числени примера,

включително атмосферна химическа схема, използвана успешно в няколко големи екологични изследвания и описана математически чрез много твърда и лошо обусловена нелинейна система от ОДУ, които илюстрират предимствата на представения подход. Числените резултати показват, че изчисленията са не само стабилни, но и постигнатата точност е по-висока, когато допълнително се прилага екстраполация на Ричардсън. От представените резултати може да се направи заключение, че е възможно да се получат подобни резултати за стабилност и точност и за други неявни методи на Рунге-Кута.

39. Harizanov, S; Lirkov, I; Georgiev, K; Paprzycki, M; Ganzha, M, Performance analysis of a parallel algorithm for restoring large-scale CT images, JOURNAL OF COMPUTATIONAL AND APPLIED MATHEMATICS, Vol: 310 Pages: 104-114, DOI: 10.1016/j.cam.2016.07.001, 2017 (IF, Q1)

В множество области на обработка на изображения, като компютърна томография, в която събирането на данни се основава на броене на частици, които удрят повърхността на детектора, се появява шум от Поасон. Използвайки вариации, стабилизиращи трансформации, шумът от Поасон може да бъде апроксимиран с Гаусов, за който могат да се използват класически филтри за обезшумяване. В тази статия са представени резултати от експериментално проучване на производителността на паралелно изпълнение на алгоритъма за възстановяване на изображението на Поасон, въведен в: Harizanov S., Pesquet JC., Steidl G. (2013) Epigraphical Projection for Solving Least Squares Anscombe Transformed Constrained Optimization Problems. In: Kuijper A., Bredies K., Pock T., Bischof H. (eds) Scale Space and Variational Methods in Computer Vision. SSVM 2013. Lecture Notes in Computer Science, vol 7893. Springer, Berlin, Heidelberg. Изследва се хибридна паралелизация, основана на стандартите MPI и OpenMP. Степента на конвергенция на алгоритъма силно зависи както от размера на изображението, така и от избора на входни параметри (ρ , σ), като по този начин максималната му паралелна ефективност е жизненоважна за приложенията в реалния живот. Реализацията е тествана за радиографски изображения с висока разделителна способност, на клъстери Linux с процесори на Intel и на суперкомпютър IBM.

40. Liolios, A., Liolios, K., Moropoulou, A., Georgiev, K., Georgiev, I., Cultural heritage RC structures environmentally degraded: Optimal seismic upgrading by tendon-ties under shear effects, Volume 10665 LNCS, 2018, Pages 516-526 (SJR)

Представен е изчислителен подход за реконструкция (укрепване) на съществуващите стоманобетонни конструкции (RC) обявени за културно наследство, които са били влошени поради екстремни действия (влияние на околната среда, сеизмични въздействия и др.). Те трябва да бъдат сеизмично модернизирани чрез използване на кабелни елементи (напрежение-връзки). Акцентира се върху срязващите ефекти, които са обичайни за старите сгради на RC, които не са проектирани според новите (след 2000 г.) изисквания за сеизмична устойчивост, касаещи практиките на строителството. Едностранното поведение на кабелните елементи и нелинейното поведение на структурните елементи на RC се вземат предвид строго и водят до конститутивни условия в съответните неравенства. За численото третиране на системата от частни диференциални отношения (PDE) се използва двойна дискретизация в пространството по метода на крайните елементи и във времето чрез директен инкрементален подход. И така, във всяка стъпка във времето се решава не-изпъкнал проблем с линейна допълняемост. Решението за оптималната схема за укрепване на кабелните елементи при сеизмични последователности се получава въз основа на изчислени индекси на щети, както е показано в представения числен пример.

41. Zlatev, Z., Dimov, I., Georgiev, K., Blaheta, R., Using advanced mathematical tools in complex studies related to climate changes and high pollution levels, Volume 10665 LNCS, 2018, Pages 552-559 (SJR)

UNI-DEM е голям екологичен модел, описан от нелинейна система от частни диференциални уравнения (PDE) и използван в много изследвания на нивата на замърсяване на въздуха в различни европейски страни. Дискретизацията на UNI-DEM води до дълга редица от огромни изчислителни задачи, тъй като е необходимо да се изпълнява дискретизираният модел с много различни сценарии за дълги периоди от много последователни години. Следователно, както изискванията за съхранение на входната и изходна информация (данни), така и изчислителната работа са огромни. В този процес е необходимо да разрешим четири трудни задачи в усилията за успешно изпълнение на необходимите симулации. По-точно трябва да се направи следното:

- а) да се прилагат бързи числени методи,
- б) да бъдат избрани подходящи процедури за разделяне по физически процеси,
- в) да се създадат алгоритми, при които да се използва ефективно кеш паметта на наличните високопроизводителни компютри
- (г) да се извърши подходяща паралелизация на компютърните програми.

При числените и компютърни експерименти са използвани данни за шестнадесет последователни години и са използвани четиринадесет различни сценария. Основната цел на тези експерименти е да се изследва далечния транспорт на потенциално опасни замърсители на въздуха до България.

42. Zlatev, Z., Dimov, I., Farago, I., Georgiev, K., Havasi, A., Absolute Stability and Implementation of the Two-Times Repeated Richardson Extrapolation Together with Explicit Runge-Kutta Methods, Lecture Notes in Computer Science, Volume 11386 LNCS, 2019, Pages 678-686, DOI: 10.1007/978-3-030-11539-5_80 (SJR)

В тази статия са представени резултати от изучаването на ефективното прилагане на двукратната повторна екстраполация на Ричардсън при предположението, че системите от обикновени диференциални уравнения (ODE) се решават числено чрез явни методи на Runge-Kutta (ERKM). Комбинациите от двукратната повторна екстраполация на Ричардсън с ERKM са нови числени методи. Изчислителната цена на стъпка от тези нови числени методи е по-висока от изчислителната цена на стъпка от основните ERKM. Редът за точност на комбинираните методи обаче става много висок: ако редът на точност на основния ERKM е p , тогава редът на точност на неговата комбинация с двукратната повторна екстраполация на Ричардсън е най-малко $p + 3$, когато функцията на дясната страна на системата на ODE е достатъчно много пъти непрекъснато диференцируема. Освен това свойствата за стабилност на новите методи са винаги по-добри от тези на основните цифрови методи, когато $p = m$ и $m = 1, 2, 3, 4$ (където m е броя на векторите на етапа в избрания ERKM). Тези две полезни свойства, по-висока точност и по-добра стабилност, често дават много разумна компенсация за увеличените изчислителни разходи на стъпка, тъй като една и съща степен на точност може да бъде постигната чрез прилагане на голяма стъпка, което води до значително намаляване на

броя на стъпки, когато се използва двукратната повторна екстраполация на Ричардсън. Този факт се потвърждава от няколко числени експерименти.

43. Zlatev, Z., Dimov, I., Farago, I., Georgiev, K., Havasi, A., Stability Properties of Repeated Richardson Extrapolation Applied Together with Some Implicit Runge-Kutta Methods, Lecture Notes in Computer Science, Volume 11386 LNCS, 2019, Pages 114-125, DOI: 10.1007/978-3-030-11539-5_80 (SJR)

В тази статия са представени са резултати от ефективното прилагане на двукратната повторна екстраполация на Ричардсън при предположението, че системите от обикновени диференциални уравнения (ODE) се решават числено чрез явни методи на Runge-Kutta (ERKM). Комбинациите от двукратната повторна екстраполация на Ричардсън с ERKM са нови числени методи. Изчислителната цена на стъпка от тези нови числени методи е по-висока от изчислителната цена на стъпка от основните ERKM. Редът за точност на комбинираните методи обаче става много висок, така например, ако редът на точност на базисната ERKM е p , тогава редът на точност на комбинацията му с двукратната повторна екстраполация на Ричардсън е поне $(p + 3)$ когато функцията на дясната страна на системата на ODE е достатъчно много пъти непрекъснато диференцируема. Освен това свойствата на стабилност на новите методи са винаги по-добри от тези на основните числени методи, когато $(p = m)$ и $(m = 1, 2, 3, 4)$ (където m е броят на броят на избраните вектори в ERKM). Тези две полезни свойства, по-висока точност и по-добра стабилност, често дават много разумна компенсация за увеличените изчислителни разходи на стъпка, тъй като една и съща степен на точност може да бъде постигната чрез прилагане на голяма стъпка, което води до значително намаляване на броя на стъпки, когато се използва двукратната повторна екстраполация на Ричардсън. Този факт се потвърждава от няколко числени експеримента.

Г8. Публикувани глави от книга

44. Zahari Zlatev, Krassimir Georgiev, Ivan Dimov, Parallel Computations in a Large-Scale Air Pollution Model, in: “Advanced Numerical Methods for Complex Environmental Models: Needs and Availability”, István Faragó, Ágnes Havasi and

Zahari Zlatev (Eds.), 2013, Bentham Science Publishers, 169-207, DOI: 10.2174/97816080577881130101; eISBN: 978-1-60805-778-8, 2013; ISBN: 978-1-60805-777-1

Компютърните кодове за големите и свръхголеми модели на замърсяване на въздуха, които обикновено се описват математически като системи от частни диференциални уравнения, много често трябва да се изпълняват ефективно на високопроизводителни компютърни архитектури. Изискването за ефективност е особено важно, когато трябва да се направи фина дискретизация на пространствената област, в която е дефинирана задачата. На практика това означава, че алгоритмите за високоскоростните съвременни компютри трябва да бъдат ефективни и заради това, че при прилагане на по-фина пространствена дискретизация се налага да се преодоляват натрупвани грешки от числените приближения, които са съизмерими и даже понякога по-големи от други неточности идващи най-вече от началните данни и граничните условия на задачата (несигурност на метеорологичните данни, данните за емисиите, скоростите на включения химически реакции и др.). В тази глава от книгата се разглежда организацията на паралелните изчисления. Основните принципи, на които се основава паралелизацията, са по-скоро общи и следователно някои от обсъжданите техники също могат да бъдат приложени към някои големи и свръхголеми модели, възникващи в други области на науката и инженерната практика.

45. Zahari Zlatev, Krassimir Georgiev, Ivan Dimov, Part C: Sensitivity of European Pollution Levels to Changes of Human-Made Emissions, in: “Advanced Numerical Methods for Complex Environmental Models: Needs and Availability”, István Faragó, Ágnes Havasi and Zahari Zlatev (Eds.), 2013, Bentham Science Publishers, 307-333, DOI: 10.2174/97816080577881130101; eISBN: 978-1-60805-778-8, 2013; ISBN: 978-1-60805-777-1, 1999

В тази глава от книгата са представени изследвания на авторите на влиянието на систематичните изменения на емисиите произхождащи от човешкия фактор. Тези изменения са симулирани посредством серия от подобрени сценарии. Получени са резултати за влиянието на тези емисии върху замърсяването на въздуха в различни части от изучаваната пространствена област. По този начин беше установено, че докато промените на серните замърсители съответстват почти по перфектен начин за промяната

на емисиите, за повечето от другите замърсители това не е вярно. Освен това, експериментите също показват, че промените в различни части на Европа може да бъде различно, въпреки че емисиите са намалени със същия фактор. Изводите са илюстрирани от много резултати, представени в таблици и графики. В края на главата накратко се обсъждат няколко идеи за бъдещи изследвания в тази посока.

46. K. Georgiev, PARALLEL ALGORITHM FOR 3D ELASTICITY PROBLEMS BASED ON AN OVERLAPPING DD PRECONDITIONER, in: “Parallel numerical computations with applications”, Ed. Tianruo Yang, Springer Science, pp 105 – 117, ISBN 978-1-4613-7371-1 ISBN 978-1-4615-5205-5 (eBook) DOI 10.1007/978-1-4615-5205-5

В тази глава от книгата е представен един алгоритъм за разделяне на основната изчислителна област на подобласти (Domain Decomposition, DD) с препокриване и неговото внедряване на паралелни компютри с обща и разпределена памет, включително кълстери от работни станции. Проблемът, който се разглежда, е численото решение на 3D еластичните системи, но основните идеи, алгоритми и кодове са приложими при 3D елиптически задачи със зададени гранични условия и прекъснати коефициенти. Системата от линейни уравнения, която трябва да бъде решена след дискретизация по метода на крайните елементи, е симетрична и положително определена и се използва методът на преобусловения спрегнат градиент, като преобусловителя се конструира по метода на разделяне на подобласти. Алгоритъмът е високо паралелизуем. Комуникационния стандарт Message Passing Interface (MPI) за комуникация между процесорите се използва както за суперкомпютри с обща памет, така и за такива с разпределени памет. Представени са резултати от числени експерименти върху две симетрични многопроцесорни системи и един IBM SP паралелен компютър с разпределена памет.