

# Резюмета на научните публикации за участие в конкурса за професор по професионално направление 4.5. Математика, специалност Изчислителна математика (високопроизводителни методи и алгоритми)

на д-р Иван Димов Лирков, доцент по научна специалност 01.01.09 – *Изчислителна математика* в ИИКТ-БАН, секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D дигитализация и микроструктурен анализ“

## Обща характеристика на представените трудове

Списъкът на публикациите включва общо 75 заглавия, от които 53 статии в международни списания и поредици и 22 статии в реферирани сборници на международни конференции.

За рецензиране в този конкурс са представени 44 от публикациите, от които 37 са в международни списания и поредици (публикации [2–10, 12, 13, 15–19, 21, 22, 24–26, 28–38, 40–44]) и 7 в реферирани сборници на международни конференции (публикации [1, 11, 14, 20, 23, 27, 39]). Тези публикации не повтарят представените за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ и за академичната длъжност „доцент“. Публикации [6, 30, 34, 36, 44] са в списания с импакт-фактор.

Представените за рецензиране работи се групират тематично:

### 1. Методи за приближено решаване на двумерни и тримерни гранични задачи

- уравнение на Стокс;
- системи частни диференциални уравнения тип конвекция-дифузия;
- задачи от теория на еластичността;
- уравнения на Максвел;
- уравнение за пренос на топлина.

### 2. Методи, основаващи се на дискретизация с:

- крайни разлики;

- линейни, билинейни и трилинейни конформни крайни елементи;
- неконформни крайни елементи.

3. Методи и алгоритми за решаване на оптимизационни задачи

4. Паралелни алгоритми и приложения върху разпределени изчислителни системи

- под управление на среда за паралелно програмиране MPI;
- реализирани върху многопроцесорни работни станции, клъстери от работни станции, Grid и Cloud.

## Методи за приближено решаване на двумерни и тримерни гранични задачи

Статии [1–7] са публикувани в специализирани научни издания и са на тема „Паралелен алгоритъм за числено решаване на двумерно и тримерно уравнение на Стокс за несвиваем флуид“. Тези публикации са равностойни на монографичен хабилитационен труд.

В [1–5] е разработен паралелен алгоритъм за числено решаване на уравнение на Стокс за несвиваем флуид, при който се използва метод за разделяне по направления. Методът се основава на проекционни схеми, които са широко използвани в изчислителната динамика на флуидите. Основната идея в новия метод се състои от сингулярна пертурбация на уравнението на Навие-Стокс, като операторът на Лаплас е заменен с оператор за разделяне по направления. На базата на тази идея решаването на уравнение на Поасон в проекционните схеми е заменено с решаване на поредици от едномерни гранични задачи от втори ред. Доказано е, че тази техника е устойчива. Използваме правоъгълна равномерна мрежа, комбинирана с апроксимация с централни разлики на вторите производни.

Алгоритъмът използва изчислителна схема от тип Кранк-Никълсън, която се състои от следните етапи: 1) предиктор на налягането, 2) обновяване на полето на скоростта, 3) корекция на налягането и 4) обновяване на налягането. За да се постигнат добри резултати върху различни паралелни компютърни архитектури и да се достигне висока паралелна ефективност решаването на задачата на Поасон при изчисляване на коректора на налягането се заменя с решения на редица едномерни задачи.

Разработеният паралелен алгоритъм използва разделяне на областта на подобласти. Разглеждаме решаването на уравнение на Стокс в правоъгълна област, дискретизирана с равномерна мрежа, която в случая на двумерна област има  $n_x \times n_y$  възли, а при тримерни задачи —  $n_x \times n_y \times n_z$  възли. Паралелният алгоритъм използва разделяне на областта на  $p_x \times p_y$  подобласти при двумерна задача и  $p_x \times p_y \times p_z$  подобласти при тримерни задачи.

Паралелният алгоритъм е тестван за числено решаване на уравнение на Стокс. Използвани са стандартни MPI комуникационни подпрограми за осъществяване на

комуникациите между процесорите, а за изпълнението на многоядрени процесори е използван OpenMP. За решаване на тридиагоналните системи линейни уравнения във всяка от подобластите при обновяване на полето на скоростта и корекция на налягането са използвани подпрограмите DPTTRF и DPTTS2 от библиотеката LAPACK.

Алгоритъмът е тестван върху суперкомпютър IBM Blue Gene/P в „Национален център за суперкомпютърни приложения“, HP клъстер (HPCG) в ИИКТ-БАН и Intel Xeon клъстер (Galera) в Centrum Informatyczne TASK. Всеки възел на IBM Blue Gene/P има един PowerPC 450 четириядрен процесор, работещ на 850 MHz, и има 2 GB памет. Един възел от клъстерите има два Intel Xeon четириядрени процесора. HPCG е с процесори, работещи на 2.8 GHz и един възел има 24 GB памет. Galera е с процесори, работещи на 2.33 GHz, и един възел има 8, 16, или 32 GB памет. Проведени са експерименти върху до 1024 възела от IBM Blue Gene/P и 256 възела от клъстер. В [5] Времето за изпълнение на разработения алгоритъм върху IBM Blue Gene/P са сравнени с времето за решаване на същата задача с помощта на софтуер Elmer.

В [6] създаваме версия, насочена към изпълнение върху масивно паралелни компютри, както и върху клъстери от многоядрени възли. Донякъде по-бавната (експериментално установена) ефективност на предложения подход се наблюдава при използване на всички ядра в един възел на съответния клъстер. За да отстраним този проблем, в [1–5] използваме подпрограми от (multi-threaded layer libraries) библиотеките MKL на Intel и ESSL на IBM, но паралелната ефективност на компютърния код за единичен (многоядрен) възел (въпреки направените подобрения) все още беше далеч от очакваната.

В [6] е разработена 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 при реализацията на алгоритъма. 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 във възела, базиран на OpenMP. Реализацията отново е тествана на Linux клъстери с Intel процесори и на IBM суперкомпютър.

В [7] са проведени числени експерименти върху суперкомпютър Авитохол в ИИКТ. Всеки възел има два Intel Xeon процесора с осем ядра, работещи на 2.6 GHz, и два Intel Xeon Phi 7120P ускорителя с 61 ядра, работещи на 1.24 GHz. Двата процесора споделят 64 GB памет, а всеки ускорител има 16 GB памет. Алгоритъмът е тестван върху до 8 възела от Авитохол.

Проведено е експериментално проучване на ефективността на паралелния алгоритъм. Проведени са експерименти за задачи, получени при брой на възлите по всяко направление между 176 и 704. За решаването на тримерната задача с  $n_1 = n_2 = n_3 = 704$  е необходима 60 GB памет, затова това е най-голямата задача, която може да се реши при използване на последователен алгоритъм и съответно за такива задачи можем да изчислим ускорение и ефективност на паралелния алгоритъм.

Първата серия експерименти е проведена, като са използвани само процесорите на суперкомпютъра. При втората серия експерименти са използвани само ускорите-

лите. И при двете серии експерименти са изследвани ускорението и паралелната ефективност на алгоритъма. При третата серия експерименти алгоритъмът е реализиран паралелно върху процесорите и ускорителите на Авитохол.

Експерименталните резултати показват съществено подобрене на времето за изпълнение при провеждане на експерименти за различни параметри на дискретизацията и брой възли на суперкомпютъра.

Метод за числено решаване на системи частни диференциални уравнения от втори ред тип конвекция-дифузия е изследван в [9]. При дискретизацията на задачата са използвани конформни крайни елементи на Courant. Паралелен алгоритъм за решаване на системи частни диференциални уравнения от втори ред тип конвекция-дифузия е разработен в [9]. За решаване на получената след дискретизация система линейни алгебрични уравнения е приложен обобщен метод на спрегнатия градиент. За получаване на суперлинейна сходимост на итерационния метод са използвани дискретни преобусловители на Helmholtz. Паралелният алгоритъм е реализиран в MPI програма. Проведени са числени експерименти върху клъстер с двупроцесорни PowerPC. Представени са резултати от числени експерименти за системи от 2 до 10 частни диференциални уравнения.

В [13] са изследвани паралелните свойства на алгоритми от тип циркулантна блочна факторизация (CBF) за решаване на системи с лошо обусловени разреждени матрици, а в [18] е направен сравнителен анализ на паралелни алгоритми, използващи преобусловители, основани на MIC(0) и CBF факторизация.

В [13, 18] е разгледана тримерна линейна задача от теория на еластичността. Задачата се описва със система частни диференциални уравнения от втори ред. Конструирани са два ефективни паралелни алгоритъма. И двата алгоритъма представляват реализация на метод на спрегнатия градиент с преобуславяне, като преобусловителят е основан на техника за разделяне по премествания (Displacement Decomposition), при което се получава блочно диагонална матрица. Първият алгоритъм използва версия на MIC(0) за решаване на системите с блоковете на DD преобусловителя, а вторият алгоритъм използва CBF за тази цел. Така са получени алгоритми DD MIC(0) и DD CBF. В [13] DD CBF алгоритъмът е приложен върху паралелни изчислителни системи, включващи от 16 до 712 процесора. Получени са резултати върху паралелна изчислителна система с обща памет NEC server Azusa Express5800/1160Xa и седем клъстера: Pentium 4 Xeon, Itanium2, AMD Opteron, Cray Strider Opteron, Dell Pentium 4 Xeon64, IBM SP Cluster 1600 и IBM Linux Cluster 1350. В [18] е направен сравнителен анализ на изпълнението на DD MIC(0) и DD CBF алгоритмите за решаване на тримерни линейни задачи от теория на еластичността. Двата паралелни алгоритъма са приложени върху паралелни изчислителни системи, включващи от 712 до 9 660 процесора. Сравнени са времената за изпълнение на алгоритмите върху три клъстера: IBM p575 Power 5, Cray XT4 и AMD Opteron.

В [22] е изследвана паралелна реализация на метода на спрегнатия градиент с преобусловител (модифицирана непълна факторизация MIC(0)) за решаване на системите частни диференциални уравнения, възникващи при числената хомогенизация на микроструктури на човешки кости. 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. 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. 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.

В [31] е разработен базов математически и компютърен модел на процесите при работа на високочестотен интерферентен портативен апарат за безконтактно отстраняване на кръвосмучещи ектопаразити. Математическият модел включва нестационарна система от нелинейни частни диференциални уравнения, описващи основните процеси. В резултат на високочестотното въздействие се създава електрическо поле. В резултат на решаване съответните диференциални уравнения се намира потенциала. Градиентът на потенциала определя количеството на отделящата се топлина. Преносът на топлина се описва с помощта на параболично диференциално уравнение. И в двата основни процеса могат да се проявят съществени нелинейности. И двата процеса са тримерни по отношение на пространствените променливи.

Математическият модел, който описва електромагнитните процеси, се определя от уравненията на Максвел:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{D} &= \rho \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0\end{aligned}$$

където  $\mathbf{H}$  е електрическо поле,  $\mathbf{J}$  е плътност на тока,  $\mathbf{D}$  е електрична индукция,  $\mathbf{E}$  е електрическо поле,  $\mathbf{B}$  е магнитно поле, а  $\rho$  е плътност на заряда. Първото уравнение отразява закона на Максвел-Ампер, второто — закона на Фарадей, а последните две — закона на Ампер.

За компютърната симулация на електромагнитните процеси е използван софтуер Comsol Multyphysics, в който е включен модула “AC/DC module - Electric and induction currents”.

Направени са експерименти в област с размери  $0.05 \text{ м} \times 0.05 \text{ м} \times 0.05 \text{ м}$ , която е разделена на две подобласти. В долната част на областта е използвана стойност на специфична електропроводимост  $\sigma = 3 \text{ S/m}$ , докато в горната част  $\sigma = 0$ . Двата електрода са със специфична електропроводимост  $\sigma = 10^7 \text{ S/m}$ . За магнитното поле граничните условия са  $\mathbf{n} \times \mathbf{A} = 0$ , където  $\mathbf{n}$  е външен нормален вектор, а  $\mathbf{A}$  е магнитен

потенциал. За електрическото поле граничните условия са: на един от електродите —  $V = V_0$ , на другия електрод —  $V = 0$ , а на останалата част от границата —  $\mathbf{n} \times \mathbf{J} = 0$ . Задачата е решена при подаване на постоянен ток и ток с честота от 1 kHz до 900 kHz.

В [41] е разработен компютърен модел на радио-честотна аблация на чернодробни тумори, който включва топлинните и електрически процеси 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 – 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. 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 крайника на сондата. Използвано е вокселно представяне на тримерната област с голяма разделителна способност.

## Методи и алгоритми за решаване на оптимизационни задачи

В [11, 16] 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) са 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 [11] 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.

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 Поасонов шум. Използвайки стабилизиращи трансформации, Поасоновият шум може да бъде трансформиран в Гаусов. Тогава могат да се използват класически филтри за обезшумяване. В [36] са представени резултати от експериментално проучване на производителността на паралелно изпълнение на един алгоритъм за възстановяване на изображение. Изследвана е хибридна паралелизация, основана на стандартите MPI и OpenMP. Сходимостта на алгоритъма силно зависи както от размера на изображението, така и от избора на входни параметри  $(\rho, \sigma)$ , 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 Linux клъстери с процесори на Intel и на суперкомпютър IBM.

В [40] е анализирана паралелна реализация на същия алгоритъм за възстановяване на изображения, използващ трансформация на Анскомб за решаването на изпъкнала оптимизационна задача с ограничения. Численото решаване на оптимизационната задача е възможно благодарение на покоординатни епиграфски проекции. Епиграфските проекции могат да бъдат ефективно пресметнати чрез метода на Нютон, приложен към подходящи начални данни, в частност към съответните нюанси на сивото, получени при предишната итерация на алгоритъма. Реализираният алгоритъм е от групата на Primal-Dual хибридно градиентните алгоритми с допълнително модифицирани дуални променливи (primal-dual hybrid gradient algorithms with modified dual variable) PDHGMp. Реализирано е хибридно паралелно приложение на алгоритъма, базирано на MPI и OpenMP стандарти. Алгоритъмът е тестван върху реални томографски изображения с висока резолюция, генерирани от индустриален компютърен томограф Nikon XTH 225.

Проведени са числени експерименти върху суперкомпютър Авитохол в ИИКТ-БАН. Всеки възел има два Intel Xeon процесора с осем ядра, работещи на 2.6 GHz, и два Intel Xeon Phi 7120P ускорителя с 61 ядра, работещи на 1.24 GHz. Двата процесора споделят 64 GB памет, а всеки ускорител има 16 GB памет. Алгоритъмът е тестван върху до 8 възела от Авитохол.

Проведено е експериментално проучване на ефективността на паралелния алгоритъм. Проведени са експерименти с изображения с размери  $723 \times 920$  и  $1446 \times 1840$  пиксела върху различен брой възли на Авитохол. Първата серия експерименти е проведена, като са използвани само процесорите на суперкомпютъра. При втората серия експерименти са използвани само ускорителите. И при двете серии експерименти са изследвани ускорението и паралелната ефективност на алгоритъма. При третата серия експерименти алгоритъмът е реализиран паралелно върху процесорите и ускорителите на Авитохол, като е използван един MPI процес върху всеки ускорител, а за процесорите са използвани варианти с един или два MPI процеса на всеки два процесора.

Както се очакваше, при използване само на процесорите, най-добрите резултати се получават за големи изображения, като се използва максималният възможен

брой нишки. Също така върху копроцесорите и за двата размера на изображенията най-добрите резултати се получават, като се използва максималният наличен брой нишки. И накрая, експерименталните резултати показват съществено подобрение при провеждането на експерименти, използващи процесори, както и копроцесори за различни размери на изображения и брой нишки. Експерименталните резултати показват съществено подобрение на времето за изпълнение при провеждане на експерименти за различни размери на изображенията и брой възли.

В настоящата версия на паралелната реализация изображението е разделено на ивици. Размерите на всички ивици са почти еднакви. В резултат на експериментите се вижда, че за малки изображения на брой възли, по-големи от три, паралелният алгоритъм работи по-бързо, използвайки само процесори, в сравнение с резултатите, използвайки само копроцесори. За да настроя конкретната реализация на алгоритъма и за по-добра производителност, тествах алгоритъма с различен брой MPI процеси на процесорите, като използвам един MPI процес на копроцесор. Като следваща стъпка, за да постигнем по-добре балансирано натоварване на хибридната архитектура, трябва да направим допълнителни промени в MPI кода. По този начин можем да избегнем или поне да намалим забавянето, причинено от различно натоварване в процесорите Intel Xeon и копроцесорите Intel Xeon Phi.

В [44] е направен сравнителен анализ на производителността на два алгоритъма за възстановяване на томографски изображения, използвайки трансформация на Анскомб за решаването на изпъкнала оптимизационна задача с ограничения. Реализирани са алгоритми PDHGMP от тип Primal-Dual хибридно градиентни алгоритми. Паралелната реализация на алгоритмите отново е базирана на MPI и OpenMP стандарти.

Числените експерименти отново са проведени върху суперкомпютъра Авитохол в ИИКТ-БАН. Реализирани са експерименти с изображения с размери  $723 \times 920$  и  $1446 \times 1840$  пиксела, генерирани от индустриален компютърен томограф Nikon XTH 225. Експериментите са проведени върху различен брой възли на Авитохол, като отново са проведени три серии експерименти: само върху процесорите на суперкомпютъра, само върху ускорителите и паралелно върху процесорите и ускорителите.

Напоследък има нарастваща тенденция за подобряване на качеството на живот, като същевременно се намаляват потреблението на енергия и емисиите на  $\text{CO}_2$ . Използването на сензори, контролери и позициониране на закрито ни приближава до постигането на тази цел. Целта на [43] е да направи опит за използване на съвременна инфраструктура за оптимизиране на енергийното управление в сградата. Представена е архитектура на решение, което използва данни от сензори за контрол на състоянието на обекта. Проведените експерименти се фокусират върху оптималното разположение на мрежовата инфраструктура в сградата.



## Паралелни алгоритми и приложения върху разпределени изчислителни системи

В [8] предполагаме, че използването на автономни софтуерни агенти в изчислителните мрежи може да предостави необходимата функционалност за ускоряване на приемането на Grid. Изследваме подход, при който екипите от агенти улесняват посредничеството и управлението на Grid ресурси. Един от интересните въпроси е как да се управлява доверието в такава система. В тази статия ние предлагаме решение. Целта на тази статия е да концептуализира процесите, свързани с доверието при проектиране на управление в системата за посредничество на агенти. Първо, идентифицираме два сценария, при които се случват четири случая на взаимодействия, основани на доверие. Второ, описваме как доверието се материализира и може да бъде измерено количествено във всеки от тях в рамките на два икономически модела: (а) наем на ресурси и (2) заплащане за употреба.

Разпределените приложения в Java (ADAJ) е платформа, разработена за изпълнение на разпределени приложения в Java. Целта на тази платформа е да улесни дизайна на приложенията и да използва ефективно силата на разпределените изчисления. ADAJ предлага както среда за програмиране, така и за изпълнение. Той реализира механизми за наблюдение на обекти и балансиране на натоварването. Механизмът за наблюдение позволява да се изчисли натоварването на JVM за всеки възел, изпълняващ ADAJ. Механизмът за балансиране на натоварването динамично адаптира натоварването в системата според тази информация. В [10] обсъждаме как оригиналният дизайн, базиран на JavaParty, да бъде заменен от използването на софтуерни агенти.

В [10] разглеждаме как могат да бъдат приложени софтуерни агенти в ADAJ. Нашите наблюдения и опит ни позволяват да определим две нива на интеграция агент-ADAJ. Високо ниво, което може да се използва без никаква пряка намеса в ADAJ и ниско ниво, което включва софтуерни агенти в ADAJ. Също така предлагаме как това може да бъде реализирано в действителност. В статията проучваме коя инфраструктура може да се използва за осигуряване на гъвкава и ефективна миграция на обекти, която също ще бъде лесно интегрируема с подходящи части на агентите.

Предлагаме подход за използване на екипи от агенти като брокери на ресурси и мениджъри в мрежата. Обсъден е общия преглед на предложената система, как ефективно да приложим услуги за нагаждане/съвпадение, както и начин, по който агентите да изберат екип, който ще изпълнява работата си. В [12] ние фокусираме вниманието си върху процеси, при присъединяване на агенти към екип. Обсъждаме процесите, свързани с агент, присъединяващ се към екип, концептуализиран в рамките на предложената по-рано базирана на агенти система за брокерство и управление на ресурси. Процесите, описани в тази статия, макар и относително опростени, могат лесно да бъдат разработени до по-стабилна версия.

Разработваме базирана на агенти инфраструктура за управление на ресурси в Grid. В предишни статии нашето внимание беше съсредоточено върху процеси на

високо ниво, при агенти, избиращи екип, към който да се присъединят, или екип, който да изпълни задача. В [14] анализираме как предлаганата базирана на агенти система може да взаимодейства с действителен Grid мидълуер. Като първоначална цел сме избрали междинния софтуер на Globus. Представяме един прост начин за изпълнение на задача и получаване на резултати и обсъждане на подробности за реализацията.

В [14] разглеждаме как инфраструктурата от агенти, предназначена да осигури „мозъка“, може да се свърже с „мускулите“, за да изпълни потребителски заявки в нея. За казуса избираме междинния софтуер Globus Grid (GT4). Статията съдържа подробно описание как е избрано решението и как да работи. Внедрена е минималистичната версия на подхода (занимаваща се само с изпълнение на двоични файлове).

Едно от важните твърдения при управлението на информацията, е, че онтологичното разграничаване на данните и семантичната обработка на информация ще позволят да се влее „интелигентност“ в информационните системи. Отделно се твърди, че софтуерните агенти, комбинирани с онтологии, ще бъдат основата на Web 4.0. В нашите изследвания разработваме управление на ресурсите базирано на агент-екип и брокерска инфраструктура за изчислителни мрежи. Предложеният на мета ниво мидълуер използва както софтуерни агенти, така и онтологии. В този контекст целта на [15] е двойна. Първо, представяме преглед на усилията за разработване на онтологии, които да се използват в Grid изчисления. Второ, анализираме коя от тях, ако има такава, трябва да бъде основната онтология на системата в процес на разработка.

Целта на [15] е да обобщи съществуващите усилия за създаване на онтология на Grid и основната интеграция агент-Grid. Основният ни въпрос беше: има ли онтология на Grid, която бихме могли да възприемем. Разглеждайки представения списък с усилия директно дефинирайки онтология на мрежата или която може да бъде реконструирана, за да се извлече такава, ние вярваме, че трябва да използваме повторно и да разширим онтологията на Core Grid, която се оказва най-близо до нашите нужди. Разширенията ще се основават първо на други усилия (или опит, извлечен от тях); по-специално проекта GLUE и UniGrid. Второ, ще трябва да въведем понятия, които са специфични за нашите усилия, напр. икономически концепции, свързани с договаряне, и концепции, свързани с доверие.

В [17] е изследван модел за изпълняване на различни Grid приложения върху разпределени изчислителни системи, като се използва система от агенти за процеса на договаряне между потребителя и собственика на изчислителните ресурси. Обсъдена е информацията, която трябва да се съхранява от агентите в системата, така че да се намали вероятността за неизпълнение на приложенията при проблеми в някой от компютрите.

Управлението на ресурсите и планирането на работни места са важен научен въпрос в изчислителните мрежи. Когато софтуерните агенти се използват като мениджъри на ресурси и брокери в мрежата, се появяват редица допълнителни проблеми и възможни подходи. Целта на [19] е: първо, да представим кратък преглед на техниките за управление на ресурсите на мрежата, намерени в стандартния Grid мидълуер. На второ място, разглеждаме опитите за използване на софтуерни агенти като Grid

мидълуер и по този начин като ресурсни брокери и за планиране на задачи. И накрая, обсъждаме как знанията, събрани в първите две части на тази статия, влияят на нашето мислене за планиране на работата в нашата система. Изводът е, че е дошло време да включим нашата система в стабилна Grid онтология. Тази онтология не само ще ни позволи да използваме широк спектър от възможни механизми за договаряне. Той също така ще предостави на планиращата програма необходимата информация за ресурсите, работата и ограниченията за нейното изпълнение. И накрая, анализът на наличните техники за планиране, извършени в контекста на нашата система (базирани до голяма степен на визията на Grid икономиката за същността на Grid изчисленията), посочи, че на този етап трябва да продължим с превръщането на един от агентите в мениджър и мета-планировчик, който има пълен контрол над работещите агенти в своя екип.

Проектът *Agents in Grid* е посветен на разработването на базиран на агенти интелигентен Grid мидълуер на високо ниво. В предложената система цялата обработка на данни се управлява от онтология и първоначално се базира на разработена собствена мини-онтология на Grid. Нашият анализ показва, че трябва да адаптираме и използваме Grid онтологията, разработена в рамките на проекта CoreGRID. Статия [20] очертава как сме модифицирали и разширили онтологията от CoreGRID, за да отговорим на нуждите на нашия подход.

Целта на [20] е двойна. Първо, обсъждаме причините, поради които онтологията CoreGRID трябва да бъде модифицирана и разширена, за да се превърне в централна част на нашия проект, целящ разработването на базиран на агенти интелигентен Grid мидълуер на високо ниво. Второ, ние описваме начина, по който тази цел е постигната. По-конкретно, представяме подробно как са създадени трите получени онтологии. Първата, *AiG Grid Ontology*, е директна модификация и разширение на CoreGrid онтологията, докато останалите две (*AiG Conditions Ontology* и *AiG Messages Ontology*) са резултат от необходимостта от улесняване на преговорите за договори.

Разработваме система, базирана на посредничество между агент и екип за управление на Grid ресурси. Един от въпросите, които трябва да бъдат разгледани, е запазването на екипа чрез дублиране на ключова информация. В [21] обсъждаме източници на информация, генерирана в системата, и обмисляме коя информация трябва да бъде дублирана, за да се подобри дългосрочното оцеляване на екипа.

Целта на [21] е да се обсъдят въпроси, свързани с дублиране на информация в система за управление на ресурсите на Grid. Фокусираме вниманието си върху информацията, генерирана в екипа, и разглеждаме четири важни случая: (1) данни на екипа, (2) работни договори и тяхното изпълнение, (3) информация, свързана с доверието, и (4) други източници на голям обем информация. Установихме, че се справяме с две основни ситуации: (а) данни с малък обем, които трябва да бъдат запазени незабавно, и (б) данни с голям обем, които може да се запазват рядко. По-нататъшният анализ показва, че събирането на данни с голям обем може да се постигне най-добре чрез използване на устройство за съхранение на данни. Това решение е избрано и ние планираме да го използваме в нашата система.

Разработваме базиран на агенти интелигентен мидълуер за Grid. Тя се основава на

екипи от агенти като брокери на ресурси и мениджъри. По-ранната ни работа доведе до реализация на прототип. Изводът от изследванията е, че е необходимо препроектиране на системата. В [25] обсъждаме новите и основните технически проблеми, открити по време на неговото изпълнение.

Целта на [25] е да се обсъди контур на реализацията и решенията, приложени към избрани технически проблеми в рамките на проекта *AiG*. Пристъпваме към тестване на гореописаните компоненти на системата, т.е. уеб приложението, приложението, базирано на агенти, и комуникационният мост между тези компоненти — приставката за взаимодействия, базирани на онтология.

Целта на [26] е да предложи метод за прилагане на онтологично представени знания в подкрепа на потребителите на Grid. Работата е представена в контекста, предоставен от системата “Agents in Grid”, която има за цел да разработи семантична инфраструктура за ефективно управление на ресурсите в Grid. Подкрепата за вземане на решения в системата трябва да предоставя функционалност отвъд съществуващия Grid мидълуер, по-специално да помогне на потребителя да избере оптимален алгоритъм и / или ресурс за решаване на проблем от дадена област. Системата подпомага потребителя в поне две ситуации. Първо, за потребители без задълбочени познания, това би трябвало да им помогне да изберат метода и ресурса, които (заедно) биха паснали най-добре на проблема, който трябва да бъде решен (и да съответстват на наличните ресурси). Второ, ако потребителят изрично посочи метода и конфигурацията на ресурса, той трябва да „провери“ дали изборът е в съответствие с препоръките на експертите. Освен това, една от целите е да се опрости използването на избрания ресурс за изпълнение на задачата; т.е. лесен за използване метод за използване на Grid, без необходимите технически познания. За постигане на споменатите цели трябва да се приложи адаптивен метод за представяне на експертни знания за системата за подпомагане на вземането на решения. Избраният подход е да се използват онтологии и семантична обработка на данни, подкрепени от многокритериално вземане на решения. Като отправна точка беше избрана област на изчислителна линейна алгебра, която да бъде моделирана, но статията представя общ подход, който лесно може да се разшири до други области.

В [27] е анализиран алгоритъм за паралелна реализация на тримерна дискретна трансформация върху компютърна система при която комуникациите между изчислителните възли се извършват в тримерна тороидална мрежа. За данни, които са с размерност  $N^3$  алгоритъмът позволява ефективно изпълнение върху  $p^3$  процесори, където  $p$  е делител на  $N$ . Разглеждания алгоритъм е подходящ за реализация върху Blue Gene суперкомпютър. Реализиран е вариант на алгоритъма, който позволява ефективно изпълнение върху  $p_x \times p_y \times p_z$  процесори за произволни  $p_x, p_y$  и  $p_z$ . Използвана е подпрограма GEMM от библиотеката BLAS, при която се постига най-голяма производителност. Използвани са не блокиращи комуникации, което позволява припокриване на изчисления и комуникации.

Проведени са числени експерименти върху суперкомпютър IBM Blue Gene/P в „Национален център за суперкомпютърни приложения“, HP клъстер (HPCG) в ИИКТ-БАН и Intel Xeon клъстер (Galera) в Centrum Informatyczne TASK. Всеки възел на

IBM Blue Gene/P има един PowerPC 450 четириядрен процесор, работещ на 850 MHz, и има 2 GB памет. Един възел от клъстерите има два Intel Xeon четириядрени процесора. HPCG е с процесори, работещи на 2.8 GHz и един възел има 24 GB памет. Galera е с процесори, работещи на 2.33 GHz, и един възел има 8, 16, или 32 GB памет. Алгоритъмът е тестван върху до 1024 възела от IBM Blue Gene/P и 256 възела от клъстер.

През 2020 г. са проведени числени експерименти върху суперкомпютър Авитохол в ИИКТ-БАН. Всеки възел има два Intel Xeon процесора с осем ядра, работещи на 2.6 GHz, и два Intel Xeon Phi 7120P ускорителя с 61 ядра, работещи на 1.24 GHz. Двата процесора споделят 64 GB памет, а всеки ускорител има 16 GB памет. Алгоритъмът е тестван върху до 32 възела от Авитохол. Проведени са три серии експерименти: само върху процесорите на суперкомпютъра, само върху ускорителите и паралелно върху процесорите и ускорителите. Получените резултати са публикувани в [42].

В [28] е изследвано използването на базирана на агенти инфраструктура за разпределение и управление на пакети в Grid среда. Използват се софтуерни агенти за описание на ресурсите и Grid структурата, различните изисквания и спецификации, съдържание на съобщенията, обменяни в системата.

Нашата работа се отнася до разработването на система за подкрепа на решения при проблем с избора на софтуер. Основната идея е да се използват експертни знания, за да се помогне на потребителя при избора на най-добрия софтуер / метод / изчислителен ресурс за решаване на изчислителен проблем. Очевидно това включва многокритериално вземане на решения и ключовият отворен въпрос е: кой метод да изберете. Контекстът на [29] е взет от проекта Agents in Grid (AiG), където трябва да се реализира изборът на софтуер (и по този начин многокритериален анализ), когато цялата информация, свързана с проблема, хардуера и софтуера е онтологично представена. Първоначално разгледахме процеса на аналитична йерархия, който е много подходящ за йерархичните структури от данни (например такива, които са формулирани от гледна точка на онтологии). Въпреки това, поради добре известните му недостатъци, решихме да разширим търсенето на метода на многокритериалния анализ, най-подходящ за въпросния проблем. В тази статия ние представяме резултатите от нашето търсене, което включва: (i) TOPSIS (Техника за предпочитание на поръчките по сходство с идеалното решение), (ii) PROMETHEE и (iii) GRIP (Генерализирана регресия с интензитет на предпочитанията). Също така накратко обсъждаме защо други методи не са били разгледани.

В [30] обмисляме комбинирането на онтологично представена информация с процеса на аналитична йерархия на Saaty, за да улесним подкрепата за вземане на решения за потребителите на Grid. Контекстът на предложението е предоставен от проекта Agents in Grid (AiG), който има за цел да разработи базирана на агенти инфраструктура за ефективно управление на ресурсите в Grid. В проекта AiG агентите формират екипи, мениджърите на които договарят с клиенти и работници условия за потенциално сътрудничество. Тук се фокусираме върху сценария, при който потребителят търси ресурси за изпълнение на задача, докато ресурсите и експертното знание за областта са организирани в онтология. Отчитайки сложния характер на описанието

на ресурсите и знанията за областта, многокритериалната оценка на това колко точно е описанието на потребителя за нейните нужди и как то може да бъде разширено / усъвършенствано, играе решаваща роля. Например, това трябва да помогне на потребителя да избере оптимален алгоритъм и / или ресурс за решаване на проблема. Освен това описанията в онтологията предложени за договори, които са резултат от автономни преговори, изискват многокритериална оценка. Методът се основава на двойни сравнения на критерии и разчита на преценката на експертна група. В контекста на проекта AiG показваме пример как многокритериалното групово вземане на решения може да се използва за подпомагане на потребителя при избора на ресурси и оценката на предложенията за договори.

Целта на [32] е проектиране на система за подкрепа на решения, базирана на онтологично представяне и семантични технологии. По-конкретно, ние разглеждаме случая, когато потребителят на Grid / Cloud описва своите изисквания по отношение на „ресурс“ като израз на клас от онтологията, докато екземплярите на същата онтология представляват налични ресурси. Целта е да се помогне на потребителя да намери най-добрия вариант по отношение на неговите / нейните изисквания, като същевременно се помни, че знанията на потребителя могат да бъдат „ограничени“. В този контекст ние обсъждаме множество подходи, базирани на семантична обработка на данни, които включват различни „форми“ на взаимодействие на потребителя със системата. По-конкретно, ние разглеждаме: (а) онтологично съвпадение, основано на SPARQL заявки и механизми за избор на съответен клас, (б) семантична близост на екземпляри, представляващи потребителски изисквания и налични ресурси, базирани на графики и (в) многокритериален анализ, базиран на метода АНР, който използва знания от експертни области (също представени онтологично).

Резултатите в [33] са опит за разширяване на разсъжденията от проекта Agents in Grid (AiG) за Clouds. AiG проектът е насочен към развитието на семантична инфраструктура за ефективно управление на ресурсите в Grid. Системата за вземане на решения в AiG помага на потребителя без задълбочени познания да избере оптимален алгоритъм и / или ресурс за решаване на проблем от дадена област и по-късно да избере най-доброто решение, при условията за сътрудничество с доставчика на ресурс, използван за решаване на задачата. Облачните изчисления се отнасят до архитектура, при която групи от отдалечени сървъри са свързани в мрежа, за да позволят онлайн достъп до компютърни услуги или ресурси. Общата визия е същата като в случая на изчислителните мрежи, т.е. да се намалят разходите за изчисления, както и да се увеличи гъвкавостта и надеждността на инфраструктурата. Съществуват обаче и важни разлики. Относително лесно е да се забележи, че решенията, разглеждани в контекста на системата AiG, могат лесно да бъдат разширени до изчисления в облак, които са се развили от изчислителни мрежи. Както беше показано в случая на Grid, интегрирането на софтуерни агенти, семантика и изчисления в облак може да даде възможност за високоефективни, интелигентни системи, правейки облакът още по-гъвкав, автономен и използваем.

Статията [34] е уводна в специалния брой „Ефективни числени методи за научни изчисления с голяма размерност“. Това е илюстрация на изискванията за разработване

на модели с добра точност. Числените резултати, получени при изчисления, извършени с помощта на UNI-DEM (Унифициран Датски Ойлеров модел), са използвани като пример за такива ефективни числени методи. Въздействията от изменението на климата върху няколко критични нива на замърсяване в различни части на Европа са систематично изследвани с помощта на високопроизводителни компютри и симулациите са извършени в период от шестнадесет последователни години с четиринадесет различни сценария. По време на това многообхватно проучване са разрешени много различни проблеми. Един от тези проблеми е свързан с правилното използване на огромните изходни файлове с данни, за да се илюстрират различни тенденции и взаимоотношения. Общият размер на тези файлове е по-голям от 200 мегабайта. Трудностите при изчисленията по време на изпълнението на модела и подготовката на изходните файлове са огромни. Изходните данни се използват за много цели. Избирайки само съответните данни, човек може да илюстрира и направи лесно разбираеми различни важни ситуации.

## Нови информационни технологии

В [23] разглеждаме два нелинейни метода за генериране на псевдослучайни числа в интервала  $[0, 1)$ , а именно квадратичен конгруентен генератор и обратен конгруентен генератор. Анализирани са комбинациите от редица на Van der Corput с разглежданите нелинейни генератори. Ние опростяваме получените редици чрез ограничаване на  $b$ -адичното представяне на точките.

Разглеждаме числено  $b$ -адическа диафония на мрежите, получени чрез квадратичен конгруентен генератор, обратен конгруентен генератор, техните комбинации с редица на Van der Corput и опростяването на смесените редици от псевдослучайни числа. Стойността на  $b$ -адическата диафония намалява с увеличаването на броя на точките на опростените редици, което доказва, че точките на опростените редици са псевдослучайни числа. Анализът на резултатите показва, че комбинациите от редица на Van der Corput с тези нелинейни генератори имат добри псевдослучайни свойства, както и генераторите.

В [24] разглеждаме  $b$ -адичната диафония като инструмент за измерване на равномерното разпределение на редици, както и за изследване на псевдослучайни свойства на редиците. Изследването на псевдослучайните свойства на равномерно разпределените мрежи е изключително важно за методите квази-Монте Карло. Известно е, че при числено интегриране по методите квази-Монте Карло грешката зависи от разпределението на точките от мрежата. От друга страна,  $b$ -адическата диафония дава информация за разпределението на точките в мрежата.

Разглеждаме няколко конкретни конструкции на редици  $(x_i)$ .  $b$ -адическата диафония на двумерните мрежи  $\{y_i = (x_i, x_{i+1})\}$  е пресметната. Числените резултати показват, че ако двумерната мрежа  $\{y_i\}$  е равномерно разпределена и редицата  $(x_i)$  има добри псевдослучайни свойства, тогава стойността на  $b$ -адическата диафония намалява с увеличаването на броя на точките. Анализът на резултатите показва пряка

връзка между псевдослучайността на точките на конструираните редици и мрежи и  $b$ -адическата диафония, както и с дискрепанса.

През последните години се наблюдава нарастващ интерес към събирането и обработката на сензорни данни в разпределени мобилни среди. В този контекст се очертават две, донякъде противоречиви тенденции: (1) нарастваща популярност на механизмите от тип *crowdsourcing*, за събиране на данни и (2) събиране на данни от сензори, които не само са недостъпни за „външни лица“, но най-често са несъвместими, като по този начин намаляват използваемостта им за извличане на данни. Предвид тези ограничения в достъпността и съвместимостта на данните се губи огромен потенциал за откриване на знания. За да се противопоставим на тази тенденция, в [35] предлагаме обща, адаптивна система, която ще позволи доброволно участие в произволни инициативи за *crowdsensing*, като изходът се съхранява в стандартен формат за данни. Системата използва многоагентен подход, основан на правила, за инструктиране на сензорите кога да събират данни и как, ако е необходимо, да ги обработят предварително, преди да споделят данните с избрани от потребителя инициативи. Първоначалната версия на системата е внедрена и тествана.

Смартфоните станаха ежедневни „спътници“ на хората. Почти всеки има смартфон в джоба или чантата си и го използва ежедневно. Съвременните смартфони са „заредени“ със сензори, осигуряващи потоци от потенциално полезни данни. В същото време поддържането на форма, упражненията, бягането, плуването и т.н. станаха модерни. В този климат работодателите могат да се опитат да стимулират своите работници да използват велосипеди, за да идват на работа. Един от интересните въпроси е: работниците всъщност използват ли велосипеди, както е декларирано, или се опитват да излъжат системата и да спечелят наградите, докато например използват обществения транспорт. Един от начините да се провери това може да бъде използването на данни от сензори на смартфони за определяне на използвания начин на транспорт. Статията [37] представя предварителни резултати от опит за използване на данни от сензори и техники за задълбочено обучение за откриване на режима на транспорт, в реално време, директно на телефона. Работата се опитва да балансира консумацията на енергия на сензора и изчислителните изисквания с коректност и време за реакция. В този контекст са представени резултати от прилагането на рекурентни невронни мрежи, както и по-традиционни подходи към действителни данни. Освен това се разглеждат подходи, които използват познанията в областта, за да направят класификаторите по-надеждни и изискващи по-малко процесорна мощ (и по-малко енергия).

Днешният динамичен растеж на броя на решенията, базирани на концепцията за Интернет на нещата (IoT), върви ръка за ръка с необходимостта от нови механизми за контрол на достъпа. Изглежда, че парадигмата за контрол на достъпа, базирана на атрибути, е добра алтернатива на често използвания модел за контрол на достъпа, който не е задължително да работи добре в големи разпределени системи. По-конкретно, основният недостатък на решенията за оторизация е произтичащата от това висока сложност на необходимите политики, особено в случая на фин контрол на достъпа (явен случай на липса на скалируемост). Ние вярваме, че решението на този проблем може да бъде чрез включване на семантични технологии в процеса на



вземане на решения. В [38] ние обсъждаме система за управление на контрола на достъпа в пристанищен терминал, базирана на прилагането на семантични технологии. Предложената система се основава на въведена и използва модифицирана версия на семантичното приложение OntoPlay. Последното позволява на неспециалистите лесно да извършват необходимите модификации на онтологията. Предложената система е тествана в полуреалистична среда и в емулатор.

Целта на [39] е да се експериментират и сравнят различни подходи за улесняване на съвместна препоръчителна система за пътници, които биха искали да посетят „туристически места“. За тази цел различни алгоритми, включително невронни мрежи от типа Кохонен (обикновени и еластични), както и семантични технологии, са приложени към набор от данни, събрани от мрежата. Проведени са експерименти за групи потребители (измерване на качеството на препоръките), както и за избрани лица. Завършеното сравнение посочва основните силни и слаби страни на всеки подход.

# Списък на публикациите

на д-р Иван Димов Лирков  
в ИИКТ-БАН, секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D  
дигитализация и микроструктурен анализ“

## List of publications

Dr. Ivan Dimov Lirkov

ИСТ-BAS, Department of Scientific Computations with Laboratory on 3D  
Digitization and Microstructure Analysis

- [1] Ivan Lirkov, Marcin Paprzycki, Maria Ganzha, and Paweł Gepner. Parallel alternating directions algorithm for 3D Stokes equation. In M. Ganzha, L. Maciaszek, and M. Paprzycki, editors, *Proceedings of the Federated Conference on Computer Science and Information Systems*, pages 443–450. IEEE Computer Society Press, 2011.
- [2] Maria Ganzha, Krassimir Georgiev, Ivan Lirkov, Svetozar Margenov, and Marcin Paprzycki. Highly parallel alternating directions algorithm for time dependent problems. In C. Christov and M. Todorov, editors, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2011*, volume 1404 of *AIP Conference Proceedings*, pages 210–217, 2011.
- [3] Maria Ganzha, Nikola Kosturski, and Ivan Lirkov. Improving the efficiency of parallel alternating directions algorithm for time dependent problems. In Michail D. Todorov, editor, *Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences*, volume 1487 of *AIP Conference Proceedings*, pages 322–328. AIP Publishing LLC, 2012.
- [4] Ivan Lirkov, Marcin Paprzycki, and Maria Ganzha. Performance analysis of parallel alternating directions algorithm for time dependent problems. In Roman Wyrzykowski, Jack Dongarra, Konrad Karczewski, and Jerzy Waśniewski, editors, *9th international conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, PPAM 2011, Part I*, volume 7203 of *Lecture notes in computer science*, pages 173–182. Springer, 2012.
- [5] Maria Ganzha, Ivan Lirkov, and Marcin Paprzycki. Comparative analysis of high performance solvers for solving Stokes equation. In Michail D. Todorov, editor, *Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences*, volume 1561 of *AIP Conference Proceedings*, pages 347–354. AIP Publishing LLC, 2013.
- [6] Maria Ganzha, Krassimir Georgiev, Ivan Lirkov, and Marcin Paprzycki. An application of partition method for solving 3D Stokes equation. *Computers & Mathematics with Applications*, 70(11):2762–2772, 2015.

- [7] M. Ganzha, I. Lirkov, and M. Paprzycki. Performance analysis of hybrid parallel solver for 3D Stokes equation on Intel Xeon computer system. In M. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2019*, volume 2164 of *AIP Conference Proceedings*, pages 120003–1–120003–8. AIP, 2019.
- [8] M. Ganzha, M. Paprzycki, and I. Lirkov. Trust management in an agent-based grid resource brokering system-preliminary considerations. In *Applications of mathematics in engineering and economics' 33: 33rd International Conference*, volume 946, pages 35–46, 2007.
- [9] János Karátson, Tamás Kurics, and Ivan Lirkov. A parallel algorithm for systems of convection-diffusion equations. In T. Boyanov, S. Dimova, K. Georgiev, and G. Nikolov, editors, *Numerical Methods and Applications*, volume 4310 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 65–73. Springer, 2007.
- [10] M. Drozdowicz, M. Ganzha, W. Kuranowski, M. Paprzycki, I. Alshabani, R. Olejnik, M. Taifour, M. Senobari, and I. Lirkov. Software agents in ADAJ: Load balancing in a distributed environment. In M. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Engineering and Economics'34*, volume 1067, pages 527–540. American Institute of Physics, 2008.
- [11] S. Fidanova and I. Lirkov. Ant colony system approach for protein folding. In M. Ganzha, M. Paprzycki, and T. Pelech-Pilichowski, editors, *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology, IMCSIT 2008*, volume 3, pages 887–891, 2008.
- [12] Wojciech Kuranowski, Marcin Paprzycki, Maria Ganzha, Maciej Gawinecki, Ivan Lirkov, and Svetozar Margenov. Agents as resource brokers in grids—forming agent teams. In I. Lirkov, S. Margenov, and J. Waśniewski, editors, *Large-Scale Scientific Computing*, volume 4818 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 484–491. Springer, 2008.
- [13] Ivan Lirkov, Yavor Vutov, Marcin Paprzycki, and Maria Ganzha. Benchmarking performance analysis of parallel solver for 3D elasticity problems. In I. Lirkov, S. Margenov, and J. Waśniewski, editors, *Large-Scale Scientific Computing*, volume 4818 of *Lecture notes in computer science*, pages 705–712. Springer, 2008.
- [14] Mehrdad Senobari, Michal Drozdowicz, Marcin Paprzycki, Wojciech Kuranowski, Maria Ganzha, Richard Olejnik, and Ivan Lirkov. Combining a JADE-agent-based Grid infrastructure with the Globus middleware — Initial solution. In *International Conference on Computational Intelligence for Modelling Control and Automation*, pages 895–900, Los Alamitos, CA, USA, 2008. IEEE Computer Society.
- [15] Michał Drozdowicz, Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, Richard Olejnik, Ivan Lirkov, Pavel Telegin, and Mehrdad Senobari. Ontologies, agents and the grid: An overview.

- In B.H.V. Topping and P. Iványi, editors, *Parallel, distributed and grid computing for engineering*, volume 21 of *Computational Science, Engineering & Technology Series*, pages 117–140, Stirlingshire, UK, 2009. Saxe-Coburg Publications.
- [16] Stefka Fidanova and Ivan Lirkov. 3D protein structure prediction. *J. Analele Universitatii de Vest Timisoara, Seria Matematica-Informatica*, 47(2):33–46, 2009.
- [17] Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, Michal Drozdowicz, Mehrdad Senobari, Ivan Lirkov, Sofiya Ivanovska, Richard Olejnik, and Pavel Telegin. Mirroring information within an agent-team-based intelligent grid middleware; an overview and directions for system development. *Scalable Computing: Practice and Experience*, 10(4):397–411, 2009.
- [18] Ivan Lirkov, Yavor Vutov, Marcin Paprzycki, and Maria Ganzha. Comparative analysis of high performance solvers for 3D elasticity problems. In S. Margenov, L. Vulkov, and J. Waśniewski, editors, *Numerical Analysis and Its Applications*, volume 5434 of *Lecture notes in computer science*, pages 392–399. Springer, 2009.
- [19] Mehrdad Senobari, Michal Drozdowicz, Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, Richard Olejnik, Ivan Lirkov, Pavel Telegin, and N. M. Charkari. Resource management in grids: Overview and a discussion of a possible approach for an agent-based middleware. In B.H.V. Topping and P. Iványi, editors, *Parallel, Distributed and Grid Computing for Engineering*, volume 21 of *Computational Science, Engineering and Technology*, pages 141–164. Saxe-Coburg Publications, 2009.
- [20] Michal Drozdowicz, Maria Ganzha, Ivan Lirkov, Richard Olejnik, Katarzyna Wasielewska, Marcin Paprzycki, and Naoual Attaoui. Utilization of modified coregrid ontology in an agent-based grid resource management system. In *Proceedings of the ISCA 25th International Conference on Computers and Their Applications, CATA 2010*, pages 240–245. International Society for Computers and their Applications, 2010.
- [21] Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, Michal Drozdowicz, Mehrdad Senobari, Ivan Lirkov, Sofiya Ivanovska, Richard Olejnik, and Pavel Telegin. Information flow and mirroring in an agent-based grid resource brokering system. In I. Lirkov, S. Margenov, and J. Waśniewski, editors, *Large-Scale Scientific Computing*, volume 5910 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 475–482. Springer, 2010.
- [22] I. Lirkov, Y. Vutov, M. Paprzycki, and M. Ganzha. Parallel performance evaluation of MIC(0) preconditioning algorithm for voxel  $\mu$ FE simulation. In R. Wyrzykowski, J. Dongarra, K. Karczewski, and J. Waśniewski, editors, *Parallel processing and applied mathematics, Part II*, volume 6068 of *Lecture notes in computer science*, pages 135–144. Springer, 2010.
- [23] Ivan Lirkov and Stanislava Stoilova. Analysis of pseudo-random properties of nonlinear congruential generators with power of two modulus by numerical computing of

- the b-adic diaphony. In M. Ganzha and M. Paprzycki, editors, *Proceedings of the International Multiconference on Computer Science and Information Technology*, volume 5, pages 309–315. IEEE Computer Society Press, 2010.
- [24] I. Lirkov and S. Stoilova. The b-adic diaphony as a tool to study pseudo-randomness of nets. In I. Dimov, S. Dimova, and N. Kolkovska, editors, *Numerical Methods & Applications*, volume 6046 of *Lecture notes in computer science*, pages 68–76. Springer, 2011.
- [25] K. Wasielewska, M. Drozdowicz, P. Szmeja, M. Ganzha, M. Paprzycki, I. Lirkov, D. Petcu, and C. Badica. Agents in grid system - design and implementation. In I. Lirkov, S. Margenov, and J. Waśniewski, editors, *Large-Scale Scientific Computing*, volume 7116 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 662–669. Springer, 2012.
- [26] Katarzyna Wasielewska, Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, and Ivan Lirkov. Developing ontological model of computational linear algebra - preliminary considerations. In Michail D. Todorov, editor, *Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences*, volume 1561 of *AIP Conference Proceedings*, pages 133–143. American Institute of Physics, 2013.
- [27] Ivan Lirkov, Marcin Paprzycki, Maria Ganzha, Stanislav Sedukhin, and Paweł Gepner. Performance analysis of a scalable algorithm for 3D linear transforms. In M. Ganzha, L. Maciaszek, and M. Paprzycki, editors, *Proceedings of the 2014 Federated Conference on Computer Science and Information Systems*, volume 2 of *Annals of Computer Science and Information Systems*, pages 613–622. IEEE, 2014.
- [28] Paweł Szmeja, Katarzyna Wasielewska, Maria Ganzha, Michał Drozdowicz, Marcin Paprzycki, Stefka Fidanova, and Ivan Lirkov. Reengineering and extending the agents in grid ontology. In I. Lirkov, S. Margenov, and J. Waśniewski, editors, *Large-Scale Scientific Computing*, volume 8353 of *Lecture notes in computer science*, pages 565–573. Springer, 2014.
- [29] K. Wasielewska, M. Ganzha, M. Paprzycki, C. Bădică, M. Ivanovic, and I. Lirkov. Multicriteria analysis of ontologically represented information. In Michail D. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2014*, volume 1629 of *AIP Conference Proceedings*, pages 281–295. American Institute of Physics, 2014.
- [30] Katarzyna Wasielewska, Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, Paweł Szmeja, Michał Drozdowicz, Ivan Lirkov, and Costin Bădică. Applying Saaty’s multicriterial decision making approach in grid resource management. *Information Technology and Control*, 43(1):73–87, 2014.
- [31] Nikola Kosturski, Ivan Lirkov, Svetozar Margenov, and Yavor Vutov. Thermoelectrical tick removal process modeling. In Ivan Lirkov, D. Svetozar Margenov, and Jerzy Waśniewski, editors, *Large-Scale Scientific Computing*, pages 369–376. Springer, 2015.

- [32] K. Wasielewska, M. Ganzha, M. Paprzycki, C. Bădică, M. Ivanovic, and I. Lirkov. Semantic technologies in a decision support system. In Michail D. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2015*, volume 1684 of *AIP Conference Proceedings*, pages 060002–1–060002–12. American Institute of Physics, 2015.
- [33] K. Wasielewska, M. Ganzha, M. Paprzycki, C. Bădică, M. Ivanovic, I. Lirkov, and S. Fidanova. Agents in grid extended to clouds. In Michail D. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2016*, volume 1773 of *AIP Conference Proceedings*, pages 070002–1–070002–9. American Institute of Physics, 2016.
- [34] Zahari Zlatev, Ivan Dimov, and Ivan Lirkov. Efficient numerical methods for large-scale scientific computations: Introduction. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 293:1–6, 2016. Efficient Numerical Methods for Large-scale Scientific Computations.
- [35] S. George, M. Ganzha, M. Paprzycki, S. Fidanova, and I. Lirkov. Building a platform to collect crowdsensing data: Preliminary considerations. In Michail D. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2017*, volume 1895 of *AIP Conference Proceedings*, pages 100002–1–100002–14. American Institute of Physics, 2017.
- [36] Stanislav Harizanov, Ivan Lirkov, Krassimir Georgiev, Marcin Paprzycki, and Maria Ganzha. Performance analysis of a parallel algorithm for restoring large-scale CT images. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 310:104–114, 2017. Numerical Algorithms for Scientific and Engineering Applications.
- [37] J. Fijalkowski, M. Ganzha, M. Paprzycki, S. Fidanova, I. Lirkov, C. Badica, and M. Ivanovic. Mining smartphone generated data for user action recognition - preliminary assessment. In M. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2018*, volume 2025 of *AIP Conference Proceedings*, pages 090001–1–090001–18, 2018.
- [38] R. Szczekutek, M. Ganzha, M. Paprzycki, S. Fidanova, I. Lirkov, C. Badica, and M. Ivanovic. System for semantic technology-based access management in a port terminal. In M. Todorov, editor, *Applications of Mathematics in Technical and Natural Sciences, AMiTaNS 2018*, AIP Conference Proceedings, pages 090002–1–090002–17, 2018.
- [39] A. Załuski, M. Ganzha, M. Paprzycki, C. Bădică, A. Bădică, M. Ivanović, S. Fidanova, and I. Lirkov. Experimenting with facilitating collaborative travel recommendations. In *2019 23rd International Conference on System Theory, Control and Computing (ICSTCC)*, pages 260–265, Oct 2019.

- [40] Ivan Lirkov. Performance analysis of a parallel denoising algorithm on Intel Xeon computer system. In Roman Wyrzykowski, Ewa Deelman, Jack Dongarra, and Konrad Karczewski, editors, *13th international conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, PPAM 2019, Part II*, volume 12044 of *Lecture notes in computer science*, pages 93–100. Springer, 2020.
- [41] Yavor Vutov, Daniel Nikolov, Ivan Lirkov, and Krassimir Georgiev. Computer simulation of a saline enhanced radio-frequency hepatic ablation process. In S. Margenov I. Lirkov, editor, *Large-Scale Scientific Computing*, volume 11958 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 382–390. Springer, 2020.
- [42] I. Lirkov. Performance analysis of a scalable algorithm for 3D linear transforms on supercomputer with Intel processors/co-processors. *Cybernetics and Information Technologies*, 20(6):94–104, 2020.
- [43] Rafał Adasiewicz, Maria Ganzha, Marcin Paprzycki, Mirjana Ivanovic, Costin Badica, Ivan Lirkov, Stefka Fidanova, and Stanislav Harizanov. Optimal placement of Internet of things infrastructure in a smart building. In Goyal D., Gupta A.K., Piuri V., Ganzha M., and Paprzycki M., editors, *Proceedings of the Second International Conference on Information Management and Machine Intelligence*, volume 166 of *Lecture Notes in Networks and Systems*, pages 661–669. Springer, 2021.
- [44] Ivan Lirkov, Stanislav Harizanov, Marcin Paprzycki, and Maria Ganzha. Performance analysis of parallel high-resolution image restoration algorithms on Intel supercomputer. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 33(4), 2021.

# Summaries of scientific publications for participation in the competition for professor in professional field 4.5. Mathematics, scientific specialty Computational Mathematics (high-performance methods and algorithms)

Dr. Ivan Dimov Lirkov, associate professor,  
scientific specialty 01.01.09 – *Computational Mathematics*  
in ICT-BAS, department of Scientific computations with laboratory on  
3D digitization and microstructure analysis

## General characteristics of the presented works

The list of publications includes a total of 75 titles, of which 53 articles in international journals and series and 22 papers in peer-reviewed proceedings of international conferences.

Here, 44 papers are used in this competition, of which 37 are in international journals and series ([2–10, 12, 13, 15–19, 21, 22, 24–26, 28–38, 40–44]) and 7 in refereed proceedings of international conferences ([1, 11, 14, 20, 23, 27, 39]). The presented papers do not repeat those presented for the acquisition of the educational and scientific degree “Doctor” and for the academic position “Associate Professor”. Five papers [6, 30, 34, 36, 44] are published in journals with impact factor.

The presented works are grouped thematically:

1. Methods for approximate solution of two-dimensional and three-dimensional boundary value problems
  - Stokes equation
  - systems of partial differential equations of convection-diffusion type
  - elasticity equations
  - Maxwell’s equations
  - heat transfer equation
2. Methods based on discretization with:
  - finite differences;
  - linear, bilinear, and trilinear conforming finite elements;
  - nonconforming finite elements.



3. Methods and algorithms for solving optimization problems
4. Parallel algorithms and applications on distributed computing systems
  - using a parallel programming environment MPI;
  - implemented on multiprocessor workstations, clusters, Grid and Cloud.

## Methods for approximate solution of 2D and 3D boundary value problems

The papers [1–7] are published in specialized scientific publications and are on the topic “Parallel algorithm for numerical solution of two-dimensional and three-dimensional Stokes equation for incompressible fluid”. These publications are equivalent to a habilitation monography.

In [1–5] we consider the 3D time dependent Stokes equation on a finite time interval and on a uniform rectangular mesh, written in terms of velocity and pressure.

For this problem, a parallel algorithm, based on a recently proposed direction splitting approach, is applied. Here, the pressure equation is derived from a perturbed form of the continuity equation, where the incompressibility constraint is penalized in a negative norm induced by the direction splitting. The scheme used in the algorithm is composed of: (a) pressure prediction, (b) velocity update, (c) penalty step, and (d) pressure correction. In order to achieve good parallel performance, the solution of the Poisson problem for the pressure correction is replaced by a solution to a sequence of one-dimensional second order elliptic boundary value problems (in each spatial direction). The parallel code is developed using the standard MPI functions and tested on modern parallel computer systems. The performed numerical tests illustrate the parallel efficiency, and scalability, of the direction-splitting based algorithm. In [5] we compared the results from the direction splitting algorithm with the results from Finite Element software package for solving of Stokes equation.

In our work, we are targeting massively parallel computers, as well as clusters of multi-core nodes. The somehow slower (experimentally-established) performance of the proposed approach was observed when using all cores on a single node of a cluster. To remedy this problem, we tried to use LAPACK subroutines from the multi-threaded layer library, but the parallel performance of the code (while improved) was still not satisfactory on a single (multi-core) node.

Our work in [6] considers hybrid parallelization based on the MPI and OpenMP standards. It is motivated by the need to maximize the parallel efficiency of our implementation of the proposed algorithm. Essential improvements of the parallel algorithm are achieved by introducing two levels of parallelism: (i) between-node parallelism based on the MPI and (ii) inside-node parallelism based on the OpenMP. The implementation was tested on Linux clusters with Intel processors and on the IBM supercomputer.

The paper [7] presents an experimental performance study of the developed parallel implementation on a supercomputer using Intel Xeon processors, as well as Intel Xeon Phi co-processors. The experimental results show an essential improvement when running experiments for a variety of problem sizes and number of cores / threads.

The numerical solution of systems of convection-diffusion equations is considered in [9]. The problem is described by a system of second order partial differential equations (PDEs). This system is discretized by Courant-elements. The preconditioned conjugate gradient method is used for the iterative solution of the large-scale linear algebraic systems arising after the finite element discretization of the problem. Discrete Helmholtz preconditioners are applied to obtain a mesh independent super-linear convergence of the iterative method. A parallel algorithm is derived for the proposed preconditioner. A portable parallel code using Message Passing Interface (MPI) is developed. Numerical tests well illustrate the performance of the proposed method on a parallel computer architecture.

In [13] we consider numerical solution of 3D linear elasticity equations described by a coupled system of second order elliptic partial differential equations. This system is discretized by trilinear parallelepipedal finite elements. Preconditioned Conjugate Gradient iterative method is used for solving large-scale linear algebraic systems arising after the Finite Element Method (FEM) discretization of the problem. The displacement decomposition technique is applied at the first step to construct a preconditioner using the decoupled block diagonal part of the original matrix. Then circulant block factorization is used to precondition thus obtained block diagonal matrix. Since both preconditioning techniques, displacement decomposition and circulant block factorization, are highly parallelizable, a portable parallel FEM code utilizing MPI for communication is implemented. Results of numerical tests performed on a number of modern parallel computers using real life engineering problems from the geosciences (geomechanics in particular) are reported and discussed.

In [18] we consider the numerical solution of 3D linear elasticity equations. The investigated problem is described by a coupled system of second order elliptic partial differential equations. This system is then discretized by conforming or nonconforming finite elements. After applying the Finite Element Method (FEM) based discretization, a system of linear algebraic equations has to be solved. In this system the stiffness matrix is large, sparse and symmetric positive definite. In the solution process we utilize a well-known fact that the preconditioned conjugate gradient method is the best tool for efficient solution of large-scale symmetric systems with sparse positive definite matrices. In this context, the displacement decomposition (DD) technique is applied at the first step to construct a preconditioner that is based on a decoupled block diagonal part of the original matrix. Then two preconditioners, namely the Modified Incomplete Cholesky factorization MIC(0) and the Circulant Block-Factorization (CBF) preconditioning, are used to precondition thus obtained block diagonal matrix.

As far as the parallel implementation of the proposed solution methods is concerned, we utilize the Message Passing Interface (MPI) communication libraries. The aim of our work is to compare the performance of the two proposed preconditioners: the DD MIC(0) and the DD CBF. The presented comparative analysis is based on the execution times of

actual codes run on modern parallel computers. Performed numerical tests demonstrate the level of parallel efficiency and robustness of the proposed algorithms. Furthermore, we discuss the number of iterations resulting from utilization of both preconditioners.

Numerical homogenization is used for up-scaling of a linear elasticity tensor of strongly heterogeneous micro-structures. In [22] utilized approach assumes presence of a periodic micro-structure and thus periodic boundary conditions. Rotated trilinear Rannacher-Turek finite elements are used for the discretization, while a parallel PCG method is used to solve arising large-scale systems with sparse, symmetric, positive semidefinite matrices. Applied preconditioner is based on modified incomplete Cholesky factorization MIC(0).

The test problem represents a trabecular bone tissue, and takes into account only the elastic response of the solid phase. The voxel micro-structure of the bone is extracted from a high resolution computer tomography image. Numerical tests performed on parallel computers demonstrate the efficiency of the developed algorithm.

Ticks are widespread ectoparasites. They feed on blood of animals like birds and mammals, including humans. They are carriers and transmitters of pathogens, which cause many diseases, including *tick-borne meningoencephalitis*, *lyme borreliosis*, *typhus* to name few. The best way to prevent infection is to remove the ticks from the host as soon as possible. The removal usually is performed mechanically by pulling the tick. This however is a risky process. Tick irritation or injury may result it vomiting infective fluids.

On a quest of creating of a portable device, which utilizes radio-frequency alternating current for contactless tick removal, in [31] we simulate the thermo-electrical processes of the device application. We use the finite element method, to obtain both the current density inside the host and the tick, and the created temperature field. The computational domain consist of host's skin, the tick, the electrodes and air.

Experiments on nested grids are performed to ensure numerical correctness of the obtained solutions. Various electrode configurations are investigated. The goal is to find suitable working parameters — applied power, duration, position for the procedure.

In [41] we consider the simulation of thermal and electrical processes, involved in a radio-frequency ablation procedure. Radio-frequency ablation is a low invasive technique for treatment of hepatic tumors, utilizing AC current to destroy unwanted tissues by heating. We simulate an ablation procedure where the needle is bipolar, i.e. no ground pad is attached. Saline solution is injected through the needle during the procedure, creating a cloud around the tip with higher electrical conductivity. This approach is safer for some patients.

The mathematical model consists of three parts — dynamical, electrical, and thermal. The energy from the applied AC voltage is determined by solving the Laplace equation to find the potential distribution. After that, the electric field intensity and the current density are directly calculated. Finally, the heat transfer equation is solved to determine the temperature distribution.

A 3D image of the patient's liver is obtained from a magnetic resonance imaging scan. Then, the geometry for the needle is added. The CGAL library is used to obtain an unstructured mesh in the computational domain. We use the finite element method in space, to obtain both the current density and the created temperature field. An unstruc-

tured mesh parallel solver is developed for the considered problem. The parallelization approach is based on partitioning the meshes using ParMETIS. Numerical tests show good performance of the developed parallel solver.

## Methods and algorithms for solving optimization problems

The protein folding problem is a fundamental problem in computational molecular biology and biochemical physics. The high resolution 3D structure of a protein is the key to the understanding and manipulating of its biochemical and cellular functions. All information necessary to fold a protein to its native structure is contained in its amino-acid sequence. Even under simplified models, the problem is NP-hard and the standard computational approach are not powerful enough to search for the correct structure in the huge conformation space. Due to the complexity of the protein folding problem simplified models such as hydrophobic-polar (HP) model have become one of the major tools for studying protein structure. Various optimization methods have been applied on folding problem including Monte Carlo methods, evolutionary algorithm, ant colony optimization algorithm. In [11, 16] we develop an ant algorithm for 3D HP protein folding problem. It is based on very simple design choices in particular with respect to the solution components reinforced in the pheromone matrix. The achieved results are compared favorably with specialized state-of-the-art methods for this problem. Our empirical results indicate that our rather simple ant algorithm outperforms the existing results for standard benchmark instances from the literature. Furthermore, we compare our folding results with proteins with known folding.

In multiple areas of image processing, such as Computed Tomography, in which data acquisition is based on counting particles that hit a detector surface, Poisson noise occurs. Using variance-stabilizing transformations, the Poisson noise can be approximated by a Gaussian one, for which classical denoising filters can be used. The paper [36] presents an experimental performance study of a parallel implementation of the Poissonian image restoration algorithm. Hybrid parallelization based on MPI and OpenMP standards is investigated. The convergence rate of the algorithm heavily depends on both the image size and the choice of input parameters  $(\rho, \sigma)$ , thus maximizing its parallel efficiency is vital for real-life applications. The implementation is tested for high-resolution radiographic images, on Linux clusters with Intel processors and on an IBM supercomputer.

The paper [40] presents an experimental performance study of a parallel implementation of the Poissonian image restoration algorithm. Hybrid parallelization based on MPI and OpenMP standards is investigated. The implementation is tested for high-resolution radiographic images on a supercomputer using Intel Xeon processors as well as Intel Xeon Phi coprocessors. The experimental results show an essential improvement when running experiments for a variety of problem sizes and number of threads.

In [44] we present an experimental performance study of a parallel implementation

of two Poissonian image restoration algorithms. Hybrid parallelization, based on MPI and OpenMP standards, is investigated. The implementation is tested for high-resolution radiographic images, on a supercomputer based on Intel Xeon processors, combined with Intel Xeon Phi coprocessors. The experimental results show an essential improvement in the execution times, when running experiments for a variety of problem sizes, and number of threads.

Recently, there is a growing trend to improve the quality of life, while reducing energy consumption and emissions of CO<sub>2</sub>. The use of sensors, controllers, and indoor positioning brings us closer to achieving this goal. The aim of [43] is outline an attempt at use of modern infrastructure for optimization of energy management in a building. An architecture of a solution that uses data from sensors to control the state of the object is presented. Performed experiments focus on optimal placement of networking infrastructure inside the building.

## Parallel algorithms and applications on distributed computing systems

In [8] it has been suggested that utilization of autonomous software agents in computational Grids may deliver the needed functionality to speed-up Grid adoption. We have outlined an approach in which agent teams facilitate Grid resource brokering and management. One of the interesting questions is how to manage trust in such a system. In the paper we outline our proposed solution. The aim of the paper was to conceptualize processes involved in trust management in the agent based resource brokering system that we are designing. First, we have identified two scenarios in which four cases of trust-based interactions take place. Second, we have described how trust materializes and can be quantified in each of them within two economic models: (a) resource rental, and (2) pay per use.

ADAJ (Distributed Applications in Java) is a platform developed for execution of distributed applications in Java. The objectives of this platform is to facilitate application design and to efficiently use the power of distributed computing. The ADAJ offers both a programming and an execution environment. In the latter it implements object observation and load balancing mechanisms. The observation mechanism allows estimating of the JVM load for each node running the ADAJ client. The load balancing mechanism dynamically adapts the workload across the system according to this information. In [10] we discuss how the original design based on JavaParty is going to be superseded by utilization of software agents.

In [10] we have considered how software agents can be introduced into the ADAJ middleware. Our observations and experiences allowed us to specify two levels of agent-ADAJ integration. The high level that can be used without any direct interference within the ADAJ and a low level that infuses software agents into ADAJ. We have also outlined how the latter proposal can be actually realized. We are currently investigating which infrastructure can be used to provide flexible and efficient object migration that will also

be easily integrable with appropriate parts of the ADAJ and JADE agents.

We have proposed an approach to utilizing agent teams as resource brokers and managers in the Grid. We have discussed the general overview of the proposed system, how to efficiently implement matchmaking services, as well as proposed a way by which agents select a team that will execute their job. In [12] we focus our attention on processes involved in agents joining a team. We discuss processes involved in an agent joining a team, conceptualized within the framework of the proposed earlier agent-team-based Grid resource brokering and management system. Processes described in the paper, while relatively simplistic, can be easily augmented to a more robust version.

We are developing an agent based infrastructure for resource management in Grids. In the past our attention was focused on high-level processes involved in agents selecting a team to join or a team to execute a job. In [14] we consider how the proposed agent-based system can interact with an actual Grid middleware. As our initial target we have selected the Globus middleware. Here, we present a simple way of submitting a job and receiving results and discuss implementation details.

In [14] we have considered how an agent infrastructure designed to provide “the brain” for the Grid, can connect with “the brawn” to execute user requests within it. For the case study we have selected the Globus Grid middleware (GT4). We have described in some detail how we have selected the solution and how it is to work. The minimalistic version of the approach (dealing only with execution of binary files) has been implemented and the code can be found within the Sourceforge repository.

One of the important claims that permeate current view of information management is that ontological demarcation of data and semantic information processing are going to allow to infuse “intelligence” into information systems. Separately, it is claimed that software agents, combined with ontologies will be the foundation of Web 4.0. In our work we are developing an agent-team-based resource management and brokering infrastructure for computational Grids. The proposed meta-level middleware is to utilize both software agents and ontologies. In this context, the aim of [15] is twofold. First, we present an overview of found efforts to develop ontologies to be used in Grid and agent-Grid computing. Second, we analyze which one of them, if any, should be the base ontology for the system under development.

The aim of [15] was to summarize existing efforts at creating an ontology of the Grid, and underlying agent-Grid integration. At the same time, the presented material was viewed from the perspective of the Agents in Grid project, which we are working on. Our main question was: is there an ontology of the Grid that we could adopt in our project. Looking at the presented above list of efforts at directly defining Grid ontology or that could be reverse engineered to extract one, we believe we should reuse and extend the Core Grid Ontology, which turns out to be the closest to our needs. Extensions will be based first, on other efforts (or experiences drawn from them); the GLUE project in particular, and the UniGrid. Second, we will have to introduce concepts that are specific to our effort, e.g. economic concepts related to contract negotiations and trust related concepts.

The paper [17] concerns a fragment of our project, devoted to the development of an agent-team-based Grid resource brokering and management system. Here, interesting

open issues that have to be addressed in the process concern agent team preservation. In our earlier work it was suggested that this can be achieved through mirroring of key information. Here, we discuss in detail sources of useful information generated in the system (an agent team in particular) and consider which information should be mirrored, when and where, to increase long-term sustainability of an agent team.

Resource management and job scheduling are important research issue in computational Grids. When software agents are used as resource managers and brokers in the Grid a number of additional issues and possible approaches materialize. The aim of [19] was three-fold. First, to present a brief overview of Grid resource management techniques found in standard Grid middlewares. Second, we have considered attempts at utilizing software agents as a Grid middleware, and thus as resource brokers and job (meta-)schedulers. Finally, we have discussed how the knowledge gathered in the first two parts influences our thinking about job scheduling within our system. We have realized, again, that time has come to infuse our system with a robust Grid ontology. This ontology will not only allow us to utilize a broad range of possible negotiation mechanisms. It will also provide the scheduler with the necessary information about the resources, the job and its execution constraints. Finally, analysis of available scheduling techniques performed within the context of our system (based heavily on the Grid economy based vision of the nature of Grid computing) pointed out that at this stage we should proceed with making the LMaster an omnipotent manager and meta-scheduler, which has total command over Workers in its team.

The *Agents in Grid* project is devoted to the development of an agent-based intelligent high-level Grid middleware. In the proposed system, all data processing is ontology-driven, and initially was based on an in-house developed mini-ontology of the Grid. Our recent analysis has indicated that we should adapt and utilize the Grid ontology developed within the framework of the CoreGRID project. The paper [20] outlines how we have modified and extended the CoreGRID ontology to fulfill needs of our approach.

The aim of [20] was two-fold. First, we have discussed the reasons why the CoreGRID ontology has to be modified and extended to become the centerpiece of our project aiming at developing an agent-based intelligent high-level Grid middleware. Second, we have outlined the way that this goal has been achieved. We have presented in some detail how the three resulting (sub)ontologies have been created. The first of them, the *AiG Grid Ontology*, is a direct modification and extension of the CGO, while the remaining two (the *AiG Conditions Ontology* and the *AiG Messages Ontology*) result from the need to facilitate autonomous agent-based contract negotiations. The paper describes the final stages of ontology design; considering technical details of dealing with constraints.

We are developing an agent-team-based Grid resource brokering and management system. One of issues that has to be addressed is team preservation through mirroring of key information. In [21] we discuss sources of information generated in the system and consider which information should be mirrored to increase long-term survival of the team.

The aim of [21] was to discuss issues involved in information mirroring in an agent-based Grid resource management system. We have focused our attention on information generated within the agent team and considered four important cases: (1) team data,

(2) job contracts and their execution, (3) trust-related information, and (4) other sources of large volume information. We have established that we deal with two main situations: (a) small-volume data that has to be mirrored immediately, and (b) large volume data that may be mirrored infrequently. Further analysis indicated that collection of large volume data may be best achieved through utilization of a contracted data storage facility. This latter solution is our solution of choice and we plan to utilize it in our system.

We are developing an agent-based intelligent middleware for the Grid. It is based on agent teams as resource brokers and managers. Our earlier work resulted in a prototype implementation. However, our research led to a complete redesign of the system. In [25] we discuss the new and main technical issues found during its implementation.

The aim of [25] was to discuss an outline of the implementations and solutions applied to selected technical problems within the scope of the *AiG* project. We are proceeding with testing of the above described components of the system, i.e. the front-end web application, the back-end agent-based application, and a communication bridge between these components—the plug-in for ontology-based interactions.

The aim of [26] is to propose a method for application of ontologically represented domain knowledge to support Grid users. The work is presented in the context provided by the Agents in Grid system, which aims at development of an agent-semantic infrastructure for efficient resource management in the Grid. Decision support within the system should provide functionality beyond the existing Grid middleware, specifically, help the user to choose optimal algorithm and/or resource to solve a problem from a given domain. The system assists the user in at least two situations. First, for users without in-depth knowledge about the domain, it should help them to select the method and the resource that (together) would best fit the problem to be solved (and match the available resources). Second, if the user explicitly indicates the method and the resource configuration, it should “verify” if her choice is consistent with the expert recommendations (encapsulated in the knowledge base). Furthermore, one of the goals is to simplify the use of the selected resource to execute the job; i.e., provide a user-friendly method of submitting jobs, without required technical knowledge about the Grid middleware. To achieve the mentioned goals, an adaptable method of expert knowledge representation for the decision support system has to be implemented. The selected approach is to utilize ontologies and semantic data processing, supported by multicriterial decision making. As a starting point, an area of computational linear algebra was selected to be modeled, however, the paper presents a general approach that shall be easily extendable to other domains.

Practical realization of 3D forward/inverse separable discrete transforms, such as Fourier transform, cosine/sine transform, etc. are frequently the principal limiters that prevent many practical applications from scaling to a large number of processors. Specifically, existing approaches, which are based primarily on 1D or 2D data decompositions, prevent the 3D transforms from effectively scaling to the maximum (possible / available) number of computer nodes. A novel, highly scalable, approach to realize forward/inverse 3D transforms has been proposed. It is based on a 3D decomposition of data and geared towards a torus network of computer nodes. The proposed algorithms requires compute-and-roll time-steps, where each step consists of an execution of multiple GEMM operations



and concurrent movement of cubical data blocks between nearest-neighbor nodes (directly using the logical arrangements of the nodes within the torus). The proposed 3D orbital algorithms gracefully avoids the, required, 3D data transposition. The aim of [27] is to present a preliminary experimental performance study of the proposed implementation on two different high-performance computer architectures.

The aim of [42] is to present an experimental performance study of an implementation on high performance computer architecture Avitohol at IICT-BAS.

Ontology engineering, despite considerable progress, is still relatively new and dynamically evolving discipline. As a result, the *universal* standards for creating and/or editing an ontology, have not been established. Furthermore, they are changing with the increasing knowledge. This leads to problems with reusing and updating existing ontologies. It also makes writing an ontology from scratch seem like a good idea. The aim of [28] is two-fold. First, to outline (i) the reasons behind reengineering of the ontology used in the *Agents in Grid* project, (ii) the process and its results, and (iii) the main lessons learned. Second, to show how the good practices of ontology development were applied to model the area of computational linear algebra. Here, special attention is paid to the application of this ontology in the user support system, based on the Saaty's AHP method.

Our work concerns the development of a decision support system for the software selection problem. The main idea is to utilize expert knowledge to help the user in selecting the best software / method / computational resource to solve a computational problem. Obviously, this involves multicriterial decision making and the key open question is: which method to choose. The context of [29] is provided by the Agents in Grid (AiG) project, where the software selection (and thus multicriterial analysis) is to be realized when all information concerning the problem, the hardware and the software is ontologically represented. Initially, we have considered the Analytical Hierarchy Process (AHP), which is well suited for the hierarchical data structures (e.g., such that have been formulated in terms of ontologies). However, due to its well-known shortcomings, we have decided to extend our search for the multicriterial analysis method best suited for the problem in question. In the paper we report results of our search, which involved: (i) TOPSIS (Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution), (ii) PROMETHEE, and (iii) GRIP (Generalized Regression with Intensities of Preference). We also briefly argue why other methods have not been considered as valuable candidates.

In [30] we consider combining ontologically represented information with Saaty's AHP to facilitate decision support for Grid users. The context for the proposal is provided by the Agents in Grid project (AiG), which aims at development of an agent-based infrastructure for efficient resource management in the Grid. In the AiG project, agents form teams, managers of which negotiate with clients and workers terms of potential collaboration. Here, we focus on the scenario, in which the user is searching for resources to execute a task, while the resources and the expert domain knowledge are organized in an ontology. Taking into account the complex nature of resource description and domain knowledge, multicriterial assessment of how accurate is the user description of her needs, and how it can be extended/refined, plays a crucial role. For instance, it should help the user to choose optimal algorithm and/or resource to solve her problem. Furthermore, ontologically

described contract proposals, that are the results of autonomous negotiations, require multicriterial assessment. The AHP method is based on pairwise comparisons of criteria, and relies on the judgment of a panel of experts. In the context of the AiG project, we show on the example of the AHP method, how multi-criteria group decision making can be used to support user in resource selection and assessment of contract proposals.

The aim of [32] is to design a decision support system based on ontological representation of domain(s) and semantic technologies. Specifically, we consider the case when Grid/Cloud user describes his/her requirements regarding a “resource” as a class expression from an ontology, while the instances of (the same) ontology represent available resources. The goal is to help the user to find the best option with respect to his/her requirements, while remembering that user’s knowledge may be “limited.” In this context, we discuss multiple approaches based on semantic data processing, which involve different “forms” of user interaction with the system. Specifically, we consider: (a) ontological matchmaking based on SPARQL queries and class expression, (b) graph-based semantic closeness of instances representing user requirements (constructed from the class expression) and available resources, and (c) multicriterial analysis based on the AHP method, which utilizes expert domain knowledge (also ontologically represented).

The work in [33] is an attempt to extend considerations from the Agents in Grid (AiG) project to the Clouds. The AiG project is aimed at the development of an agent-semantic infrastructure for efficient resource management in the grid. Decision support within the AiG system helps the user, without in-depth knowledge, to choose optimal algorithm and/or resource to solve a problem from a given domain, and later to choose the best contract defining terms of collaboration with the provider of a resource used to solve the problem. Cloud computing refers to an architecture, in which groups of remote servers are networked, to allow online access to computer services or resources. The general vision is the same as in the case of computational grids, i.e., to reduce cost of computing, as well as to increase flexibility and reliability of the infrastructure. However, there are also important differences. It is relatively easy to notice that solutions considered in the context of the AiG system can be easily extended to computational clouds that evolved from computational grids. As it was shown in the case of grids, integrating software agents, semantics and cloud computing could enable highly efficient, intelligent systems, making clouds even more flexible, autonomic and usable.

The paper [34] is an introductory paper in the special issue “Efficient numerical methods for large-scale scientific computations”. It is an illustration of the requirements for achieving sufficiently accurate model. The numerical results obtained in computations carried out by using the Unified Danish Eulerian Model (UNI-DEM) are used as an example for such efficient numerical methods. Actually, impacts of the climatic change on several critical pollution levels in different parts of Europe were systematically studied by using high-speed computers and the runs were carried out on a time-period of sixteen consecutive years with fourteen different scenarios. Many different problems had to be resolved during this very comprehensive study. One of these problems was related to the correct use of the huge output data files in order to illustrate different trends and relationships. The total size of these files was greater than 200 Mega-Bytes. The computational difficulties

during the runs of the model and the preparation of the output files were enormous. The output data had to be used for many purposes. By selecting only the relevant data, one can illustrate and make easily understandable different important situations.

## New information technologies

In [23] we consider two nonlinear methods for generating uniform pseudo-random numbers in  $[0, 1)$ , namely quadratic congruential generator and inversive congruential generator. The combinations of the Van der Corput sequence with the considered nonlinear generators are proposed. We simplify the mixed sequences by a restriction of the  $b$ -adic representation of the points.

We study numerically the  $b$ -adic diaphony of the nets obtained through quadratic congruential generator, inversive congruential generator, their combinations with the Van der Corput sequence, and the simplification of the mixed sequences. The value of the  $b$ -adic diaphony decreases with the increase of the number of the points of the simplified sequences which proves that the points of the simplified sequences are pseudo-random numbers. The analysis of the results shows that the combinations of the Van der Corput sequence with these nonlinear generators have good pseudo-random properties as well as the generators.

In [24] we consider the  $b$ -adic diaphony as a tool to measure the uniform distribution of sequences, as well as to investigate pseudo-random properties of sequences. The study of pseudo-random properties of uniformly distributed nets is extremely important for quasi-Monte Carlo integration. It is known that the error of the quasi-Monte Carlo integration depends on the distribution of the points of the net. On the other hand, the  $b$ -adic diaphony gives information about the points distribution of the net.

Several particular constructions of sequences  $(x_i)$  are considered. The  $b$ -adic diaphony of the two dimensional nets  $\{y_i = (x_i, x_{i+1})\}$  is calculated numerically. The numerical results show that if the two dimensional net  $\{y_i\}$  is uniformly distributed and the sequence  $(x_i)$  has good pseudo-random properties, then the value of the  $b$ -adic diaphony decreases with the increase of the number of the points. The analysis of the results shows a direct relation between pseudo-randomness of the points of the constructed sequences and nets and the  $b$ -adic diaphony as well as the discrepancy.

Recent years have seen growing interest in collecting and processing sensor data, in distributed mobile environments. In this context, two, somewhat contradictory, trends have emerged: (1) growing popularity of crowdsourcing-type mechanisms, for (sensor) data collection, and (2) collecting sensed data in data “silos”, which are not only unavailable to “outsiders”, but most often incompatible, thus reducing their usability for data mining. Given these limitations in data accessibility, and compatibility, enormous potential for knowledge discovery is lost. To counter this trend, in [35] we propose a generic, adaptive, system that will allow voluntary participation in arbitrary crowdsensing initiatives, with the output stored in a standard data format. The system utilizes a rule-based multi-agent approach to instructing sensors when to make readings and how to, if necessary, preprocess them, before sharing the data with user-selected initiatives. The initial version

of the system has been implemented, and tested in artificial use case scenario.

Smartphones became everyday “companions” of humans. Almost everyone has a smartphone in their pocket, or bag, and use it on daily basis. Modern smartphones are “loaded” with sensors, providing streams of, potentially useful, data. Simultaneously, staying fit, exercising, running, swimming, etc. became fashionable. In this climate, employers can try to stimulate their workers to use bicycles to come to work. Here, one of interesting questions becomes: are workers actually using bicycles, as declared, or do they try to subvert the system and win the prizes, while, for instance, using public transport. One of the ways to check this could be to use data from smartphone sensors to determine the mode of transportation that has been used. The paper [37] presents preliminary results of an attempt at using raw sensor data and deep learning techniques for a transportation mode detection, in real-time, directly on a phone. The work tries to balance sensor power consumption and computational requirements with correctness and response time. In this context, results of application of recurrent neural networks, as well as more traditional approaches, to an actual data, are presented. Furthermore, approaches that leverage domain knowledge in order to make classifiers more reliable and requiring less processing power (and less energy) are considered.

Today’s dynamic growth of the number of deployed solutions, based on the Internet of Things (IoT) concept, goes hand-in-hand with the need for new access control mechanisms. The Attribute Based Access Control (ABAC) paradigm seems to be a good alternative to the, commonly used, Role Based Access Control (RBAC) model, which does not necessarily work well in large-scale distributed systems. Specifically, the main drawback of the policy-based authorization solutions is the resulting high complexity of required policies, especially in the case of fine-grained access control (a clear case of lack of scalability). We believe that this problem can be appeased by incorporating semantic technologies into the decision-making process. In [38] we discuss a system for managing access control in a port terminal, based on application of semantic technologies. The proposed system is based on introduced and uses a modified version of the OntoPlay semantic application. The latter allows non-specialists to easily perform needed modifications of the ontology. The proposed system has been tested in a semi-realistic environment and in an emulator.

The aim of [39] was to experiment with, and compare, various approaches to facilitate a collaborative recommender system, for travelers who would like to visit “tourist places”. For this purpose, different algorithms, including Kohonen-type neural networks (plain and elastic), as well as semantic technologies, have been applied to a dataset collected from the Web. Experiments have been performed for groups of users (measuring quality of recommendations), as well as for selected individuals. Completed comparison points out to main strength and weakness of each approach.