

**Обща характеристика и резюмета  
на публикациите в областта на Монте Карло и квази-Монте Карло методи и  
алгоритми**

**на доцент д-р Анета Недева Караиванова, ИИКТ - БАН,**

представени за участие в конкурс за присъждане на академичната длъжност професор по специалност 01.01.12 «Информатика» (*Квази-Монте Карло методи и алгоритми*) в професионално направление 4.6 «Информатика и компютърни науки», обявен за нуждите на ИИКТ-БАН, в «Държавен вестник» бр. 55 от 19 юли 2011 г., стр. 64.

**A. Обща характеристика на публикациите в областта на Монте Карло и квази-Монте Карло методите.**

Представен е списък на публикациите в областта на Монте Карло и квази-Монте Карло методите, който включва общо 68 заглавия, от които

- 10 публикации по дисертацията за образователната и научна степен доктор „Монте Карло методи за паралелна обработка [41,42,43,44,45,58,59,60,61,62] – работите са публикувани в периода 1993-1996, и съдържат резултати в областта на Монте Карло методите и тяхното приложение;
- 11 публикации, представени за рецензиране в конкурса за старши научен сътрудник II степен през 2000 г. [33,34,35,36,37,38,39,40,57,63,68] – работите са публикувани основно в периода 1997-2000, и съдържат резултати в областта на Монте Карло и първите резултати по квази-Монте Карло за задачи на линейната алгебра (които са първите публикации изобщо в тази област в световната литература);
- 47 работи са публикувани в периода след хабилитацията, 2001-2011, и съдържат нови резултати в областта на квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи и тяхното приложение за реални задачи. Областта на изследванията, стартирали с матрично-векторни пресмятания, се задълбочава в областта на линейната алгебра и се разширява с изследвания в други области (интегрални уравнения, гранични задачи), нови подходи (разклоняващи се вериги на Марков), оценка на изчислителната сложност, ефективно използване на съвременните изчислителни средства (високопроизводителни кълъстери, изчислителен грид, кълъстери от графични карти). От тези работи, 40 са представени за участие в този конкурс.

Представените за рецензиране 40 работи [1, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 46, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 67] се групират по издания, както следва:

Монография – 1 бр.;

Journal on Mathematics and Computers in Simulation – 3 публикации, [5,25,30];

Journal on Monte Carlo Methods and Applications – 2 публикации, [20, 21];

Journal of Scalable Computing: Practice and Experience – 2 публикации, [6, 10];

Journal of Applied Mathematical Modeling – 1 публикация, [13];

Journal of Earth Science Informatics – 1 публикация, [7];

Serdica Journal of Computing – 1 публикация, [9];

Journal of Int. Sci Publication: Ecology&Safety – 1 публикация, [12];

Springer LNCS – 16 публикации, [3,8,11,14,15,16,17,18,19,22,24,26,27,28,31,32]

Springer MCQMC – 2 публикации [23, 29].

От представените 40 работи, 30 са публикувани в издания с импакт фактор или в специализирани международни издания.

**ЗАБЕЛЕЖКА:** Другите публикации на автора, извън представения списък от 68 заглавия, са в области като параметрична идентификация на разпределени обекти, автоматизация на проектирането и изглаждане на данни. Не е представен техен списък, понеже не са по темата на конкурса.

### ***A1. Мотивация за направените изследвания***

Мотивацията за изследванията, извършени през последните 10 години е следната:

Монте Карло методите (МКМ) са едни от най-разпространените и широко използвани числени методи. Поради тяхната робастност, МК е единствено възможният подход за широк клас задачи с много висока размерност от различни области (от атомна физика до финансова математика). Цената на тази робастност е бавната скорост на сходимост в някои случаи,  $O(N^{-1/2})$ , при  $N$  – размер на извадката. Има два общи подхода за подобряване на сходимостта на МКМ: намаляване на дисперсията на оценяваната величина, и използването на редици с малък дискрепанс (наричани квазислучайни редици) вместо обичайните псевдослучайни числа (както и комбинации от двата подхода). Докато псевдослучайните генератори са конструирани, така че да имитират поведението на истински случайните числа, квазислучайните редици са построени така, че да са толкова равномерно разпределени, колкото е математически възможно. Методите, основани на квазислучайни редици и наричани *квази-Монте Карло методи*, бързо придобиват широка популярност. При използване на квазислучайни редици, сходимостта на квази-МКМ е  $O(N^{-1} \log^s N)$ , където  $s$  е размерността на задачата. След интензивната работа по квази-Монте Карло методи за многомерни интегрални (първото успешно приложение – във финансовата математика), от 2000 г. започнаха интензивни изследвания и по приложението им в

задачи с вериги на Марков.). Тези приложения не са тривиални поради наличие на корелация в редиците – понякога се използва специално пренареждане, друг път се прави разбъркване (scrambling), т.е., различни пермутации на ниво бит, или събиране по модул с псевдослучайни числа, или се използват хибридни методи, които комбинират квази и псевдослучайни числа.

Използването на редиците с малък дискрепанс води до намаляване на грешката, но определянето на практически удобна оценка на грешката изобщо не е тривиално, поради практически неизползваемите граници на грешката, определени от неравенството на Коксма-Хлавка. Практиката в Монте Карло да се използва определен критерий за грешка като детерминистично условие за край е почти невъзможно да се постигне при квази-Монте Карло методите без допълнителна технология. За да се осигури такава динамична оценка, се прилагат *рандомизирани квази-Монте Карло методи*, при които случайността се постига чрез разбъркване (scrambling) на квази-случайните редици или други рандомизиращи техники. Може да се докаже, че при сравнително слаби условия всяко от рандомизираните квази-Монте Карло правила е статистически независимо и може да се използва за формиране на традиционната МК оценка на грешката, като се използват доверителни интервали, основани на дисперсията на извадката. Най-важният елемент от рандомизираните квази-Монте Карло методи е бърз и ефективен алгоритъм за разбъркване на редицата.

Монте Карло и квази-Монте Карло методите обикновено се използват за изчислително тежки задачи, поради което се налага числените експерименти да се извършват върху съвременни високопроизводителни системи (включително суперкомпютри, Гридове и клъстери).

## **A2. Основни резултати:**

*Най-общо получените резултати могат да бъдат характеризирани като конструиране, изследване и паралелна реализация върху съвременни изчислителни системи на нови квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи и алгоритми за приближено решаване на интеграли, интегрални уравнения, елиптични гранични задачи и задачи на линейната алгебра.*

Резултатите могат да се структурират в следните подобласти:

### **A2.1. Квази-Монте Карло методи за задачи на линейната алгебра [9, 13, 18, 25, 27, 28, 29, 30, 46]**

*Конструирани са и са изследвани нови или подобрени квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи и алгоритми за решаване на системи линейни уравнения, намиране на екстремални собствени стойности на големи разредени матрици и обръщане на матрици. Конструиран е нов хибриден метод за пресмятане на най-малката собствена стойност на матрица, който включва бърз*

*Монте Карло метод за намиране на приближение на обратната матрица, детерминистична процедура за подобряване на получената апроксимация, и квази-Монте Карло вариант на степенния метод. Конструирани и изследвана е схема с използване на квази-Монте Карло метод за приближено намиране на повече от една собствена стойност.*

С цел изследване на сходимостта на квази-Монте Карло алгоритмите за разглежданите задачи са преформулирани в термините на интегрални уравнения с подходящо избрани ядра и области. Това преформулиране позволява да се използва неравенството на Коксма-Хлавка при анализирането на сходимостта на разглежданите алгоритми. Теоретично и с числени експерименти е показано, че използването на квазислучайните редици подобрява скоростта на сходимост на съответните Монте Карло алгоритми. За всеки един от разглежданите алгоритми е пресметната изчислителната сложност, която има един и същи порядък за съответстващите си Монте Карло и квази-Монте Карло алгоритми. Намаляването на времето за пресмятане при квази-Монте Карло реализациите се дължи не само на подобрената скорост на сходимост, но и на използването на бързи генератори на квазислучайни числа.

Разработени са рандомизирани квази-Монте Карло алгоритми за матрични пресмятания с използване на разбъркани редици. Използването на квазислучайните редици подобрява скоростта на сходимост на съответните Монте Карло алгоритми, но не дава възможност за апостериорна оценка на грешката и не е подходящо за изпълнение в грид среда. Разбъркването на редиците позволява избягването на тези два недостатъка. При това, изчислителната сложност има един и същи порядък за съответстващите си Монте Карло и квази-Монте Карло алгоритми. Кодовете, реализиращи разработените алгоритми, са тествани върху Грид клъстерите на ИПОИ-БАН.

Всички алгоритми имат паралелни версии. Направените числени експерименти върху клъстер от работни станции с използване на MPI и показват много добра паралелна ефективност. Приложени са в задача за извличане на информация.

## **A2.2. Квази-Монте Карло методи за гранични задачи [15, 16, 20, 21, 23, 24, 50]**

Конструирани са и са анализирани нови квази-Монте Карло подходи за решаване на елиптически гранични задачи. Изследвани са хибридни и рандомизирани квази-Монте Карло варианти на случайно блуждаене по мрежа, случайно блуждаене по сфери, случайно блуждаене по кълба и случайно блуждаене по границата. Получени са теоретични оценки за скоростта на сходимост, алгоритмите са тествани върху различни моделни задачи и са приложени за изследване на електростатичните свойства на органични молекули в разтворител. Разработени са паралелни варианти, тествани върху високопроизводителни клъстери от работни станции и изчислителен грид.

Разработени са квази-Монте Карло методи за решаване на задачи с разклоняващи

се вериги на Марков. [11, 16]

### **A2.3. Квази-Монте Карло за приближено пресмятане на многомерни интеграли [1, 3, 7, 10, 19, 22, 26, 31, 51]**

В [1] подробно са изложени основните Монте Карло, квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи за приближено пресмятане на интеграли. Дискутирана е приложимостта им, предимствата и недостатъците.

В представените публикации са конструирани, изследвани и реализирани паралелно върху различни изчислителни системи:

- квази-Монте Карло метод за приближено пресмятане на интеграли, вариант на „разделяне по важност“ (importance separation) [31], който комбинира идеята за разделяне на областта на интегриране на равномерно малки подобласти с подхода на Кан за избор на преходна плътност в съответната област. Доказано е, че методът е с оптимален ред на сходимост за функции с ограничена производна. Методът е обобщен за интегрални уравнения [22].
- *адаптивни варианти* на разделяне по важност и на обикновения Монте Карло метод [26];
- нов суперсходящ метод за решаване на многомерни интеграли, [19]. Методът се явява естествено развитие на метода «разделяне по важност», като допълнително се прилага *полиномиална интерполация в подобластите*. Направен е анализ на стохастичната грешка. Числените резултати за моделна задача потвърждават теоретичните резултати за грешката.
- 

Изследвани са различни квази-аналози на Монте Карло методите с намалена дисперсия (важна извадка с плътност, пропорционална на подинтегралната функция, важна извадка с метод на селекцията, важна извадка с изгладен метод на селекцията; претеглена равномерна извадка; метод на стратификацията и др.) с различни редици (случайни, псевдослучайни, квазислучайни, разбъркани) върху различни компютърни архитектури - високопроизводителни клъстери, гридове и високопроизводителни графични карти, [3, 7, 10, 51]

### **A2.4. Генериране и изследване на редици [1, 3, 11, 49, 51, 52]**

В монографията [1] е представена съвременната теория за генериране на случайни, псевдослучайни и квазислучайни редици, които се използват в научните изследвания. Разгледани са най-известните редици (на Собол, Холтън, Фор, Нидерайтер и др.), техните модифицирани и разбъркани (scrambled) варианти.

В [3] са изследвани линейни рекурентни редици над крайни пръстени, които са стриктно балансираны, т.е. всеки елемент се появява еднакъв брой пъти. За редици от втори и трети ред са намерени подходящи параметри. Конструиранията два генератора са тествани за пресмятане на многомерни интеграла.

В [11] е представен оригинален алгоритъм, реализиращ метода на Оуен за рандомизиране на квазислучайна редица, адаптиран за пресмятане върху високопроизводителни графични карти с използване на CUDA.

Разработен, тестван и използван за пресмятане на интеграла е грид-приложим генератор за разбъркана редица на Собол [49].

Изследвана е хибридна редица с размерност  $s$ , чиито първи  $n$  координати са координати на  $n$ -мерна квазислучайна редица, а следващите  $s-n$  координати са псевдослучайни числа. Редицата е използвана в алгоритъма “случайно блуждаене по кълба” за решаване на тримерна елиптична гранична задача, [23].

Изследвана е генерацията на “истински” случайни числа посредством устройството Quantum Random Bits Generator (QRBG), [51, 52]. Използван е специален интерфейс към устройството- Quantum Random Bits Generator Service (QRBGS) – чрез който числата са достъпни онлайн и с известно качество.

#### **A2.5. Разработване и изследване на квази-Монте Карло методи, за решаване на квантови уравнения, описващи електронен транспорт в полупроводници и квантови жици. Гридификация и визуализация на числените резултати и анализ на изпълнението върху Грид [5, 6, 8, 14, 17, 22, 53, 54, 55]**

Разработени са няколко версии на Грид приложение, наречено от авторите **SALUTE (Stochastic ALgorithms for Ultra-fast Transport in sEmiconductors)**. То включва алгоритми от тип Монте Карло, квази-Монте Карло и хибридни алгоритми за изследване на ултра-бърз транспорт в полупроводници и квантови жици, както и схема за Грид изпълнение, специално разработен графичен интерфейс за работа върху Грид инфраструктурата, средства за наблюдение на изпълнението, анализ и визуализация на резултатите. Изследвана е изчислителната сложност на алгоритмите, обоснована е нуждата от използване високопроизводителни изчислителни системи, включително Грид-системи, и са предложени различни способности за максималното им натоварване.

- Разработени са два нови алгоритъма [22, 53];
- Изследван е квазислучайния подход за решаване на разглежданите задачи [6, 8];
- Изследван е хомогенния случай на задачата с приложено електрично поле – получени са нови резултати за физическите параметри [55];

- Разработена е първата завършена версия на приложението, в която са представени симулации върху грид за еднолентов проводник и квантова жица без приложено електрично поле (получени са резултати за 200 fs), [17]
- Изследван е нехомогенния случай на задачата с приложено електрично поле – получени са нови резултати за физическите параметри, разработен е Графичен потребителски интерфейс; [14];
- Разработени са схеми за ефективно грид изпълнение, адекватни на развитието на грид мидълуера и грид услугите [54].

## **A2.6. Паралелни пресмятания и ефективна реализация върху съвременни изчислителни системи**

Голямата популярност на Монте Карло и квази-Монте Карло методите се дължи и на факта, че често пъти те са единственото решение за големи и много големи задачи, което от своя страна е свързано с използването на мощни изчислителни системи и ефективната реализация алгоритмите върху тях. В почти всички публикации са показани числени експерименти на предлаганите алгоритми върху високопроизводителни клъстери и/или върху изчислителен грид, а някои публикации специално изследват паралелната ефективност.

С цел ефективно изпълнение на приложенията, разработени са грид услуги и мидълуеър, като публикациите [64-67], са направени в български издания с цел популяризиране на възможностите на съвременните изчислителни системи. От тях само [67] е представена за участие в конкурса.

## ***В. Резюмета на научните публикации, предоставени за участие в конкурса.***

Следват резюмета на научните публикации, предоставени за участие в конкурса, като номерата съответстват на номерата на публикациите в общия списък на научни публикации в областта на Монте Карло и квази-Монте Карло методи и алгоритми:

1. А. Караиванова, *Стохастични числени методи и симулации*, ИИКТ-БАН, 97 стр., 2011 (подготвена за печат)

Книгата е в обем от 97 стр., структурирана в 6 глави: Увод, Симулиране на вероятностни разпределения (генератори на псевдослучайни числа, симулиране на дискретни случайни величини, симулиране на непрекъснати случайни величини), Квазислучайни редици, Монте Карло методи, Квази-Монте Карло методи, и Паралелни пресмятания. Книгата е свързана с едноименния курс лекции, четени от автора на студентите (бакалаври и магистри) от специалност статистика в Софийски университет „Св. Кл. Охридски“, Факултет по математика и информатика през последните три години. Това е и причината за отсъствието на уводна глава,

съдържаща основни понятия и факти от теория на вероятностите и статистика. Изложеният материал е съобразен със съвременното състояние на областта и практиката на водещите световни университети.

3. S. Ivanovska, A. Karaivanova, N. Manev (2011), Numerical Integration Using Sequences Generating Permutations, LSSC 2011, to appear in *Springer LNCS*.

Изследвани са линейни рекурентни редици над крайни пръстени, които са стриктно балансирани, т.е. всеки елемент се появява еднакъв брой пъти. За редици от втори и трети ред са намерени подходящи параметри и са дефинирани два конкретни генератора, които са тествани върху два класа тестови функции (гладки и негладки) с размерност до 100. Тестовите показват по-малка грешка при интегриране и значително по-малко изчислително време в сравнение с тестовите с най-добрия в момента генератор Mersenne Twister.

5. E. Atanassov, T. Gurov, A. Karaivanova, M. Nedjalkov, D. Vasileska, K. Raleva (2010), Electron-phonon interaction in nanowires: A Monte Carlo study of the effect of the field, *Mathematics and Computers in Simulation*, 81 (2010), pp. 515-521, ISSN 0378-4754. (IF 0.946)

В работата е анализирана фемтосекундната динамика на силно не-равновесни носители с Монте Карло подход. Разглежданият физически процес се описва чрез квантово-кинетично уравнение, което обобщава класическото уравнение на Болцман по отношение на две класически предположения, а именно за времева и пространствена локалност на взаимодействието електрон-фонон. Ние изследваме специалният ефект от приложено електрическо поле върху взаимодействието електрон-фонон. За симулация на процеса се използва Монте Карло. Получени и анализирани са резултати за еволюцията на носителите в галиево-арсениевы квантови жици.

6. E. Atanassov, T. Gurov and A. Karaivanova (2010), Ultra-fast Carrier Transport Simulation on the Grid. Quasi-Random Approach. *Journal of Scalable Computing: Practice and Experience (SCPE)*, Vol. 11, no.2, 2010, pp. 137-147, ISSN 1895-1767.

Задачата за симулация на свръх-бърз пренос на електрони в нано-електронни устройства е изчислителна задача, която изисква значителни високопроизводителни и/или грид изчислителни ресурси. Най-често за тази симулация се използват Монте Карло методи. Тук ние представяме успешно прилагане на рандомизирани квази-Монте Карло алгоритми.

Тази работа е разширен вариант на работата [5], представена на PPAM 2009. Допълнително е включен алгоритъма за генериране на разбъркани редици на Соболев и Нидеррайтер, както и подробно описание на грид инфраструктурата и схемата на грид изпълнение.

7. E. Atanassov, A. Karaivanova, T. Gurov, S. Ivanovska, M. Durchova, and D. St. Dimitrov (2010), Quasi-Monte Carlo Integration on the Grid for Sensitivity Studies, *Earth Science Informatics Journal*, Springer, (2010), Volume 3, Number 4, pp.289-296, 2010, ISSN 1865-0473.

В тази работа е представена важна част от грид приложението MCSAES (Monte Carlo Sensitivity Analysis for Environmental Studies), чиято цел е да разработи ефективно грид изпълнение на Монте Карло подхода за анализ на чувствителността на модели от областта



на околната среда. Представена е схемата за грид изпълнение, която позволява напълно самостоятелна работа на двата основни модула: натрупване на данни от модела върху грида (с използване на LFC), и Монте Карло процедури, използвани за анализ на чувствителността.

В работата са представени паралелни квази-Монте Карло алгоритми за пресмятане на многомерни интегрални в грид среда. Алгоритмите са тествани върху два класа тестови функции (гладки и негладки) с размерност до 100. Времето за изпълнение върху един процесор на квази-Монте Карло варианта е средно 10 пъти по-малко от времето на изпълнение на съответния Монте Карло вариант, поради използването на специални бързи генератори на редици на Соболю. Паралелното изпълнение е тествано едновременно върху двата основни грид клъстера, разположени в ИПОИ-БАН, единият от които е с карти Mynnet, а другият – с обикновена свързаност. При изпълнението на алгоритмите върху грид е използвана нова версия на разработената от авторите грид услуга -JTS, която позволява:

- резервация на процесори за изпълнение на паралелни задачи;
- събиране и анализ на резултатите от изпълнение на паралелни задания.

Алгоритмите показват много добра паралелна ефективност.

8. E. Atanasov, A. Karaivanova, and T. Gurov (2010), Quasi-random approach in the Grid application SALUTE, *Springer LNCS* vol. **6068**, 2010, pp. 204-213, ISSN 0302-9743.

Грид приложението SALUTE интегрира няколко Монте Карло, квази-Монте Карло и хибридни алгоритми за решаване на различни изчислително-интензивни задачи, важни за индустрията (проектиране на съвременни полупроводникови устройства). SALUTE изучава квантовите ефекти по време на фемтосекундния процес на релаксация при взаимодействието електрон-фонон в еднолентови полупроводници или квантови жици. Две са основните причини за използването на изчислителен грид: сложността на квантовите задачи, и вътрешната паралелност на Монте Карло методите, която позволява ефективно използване на грид ресурсите.

В тази работа е изследван квазислучайния подход в грид приложението SALUTE с използване на специално модифицирани редици на Холтън, Соболю и Нидерайтер. Направени са голям брой тестове върху грид инфраструктурата в Югоизточна Европа с използване на специално разработена схема за изпълнение върху грид. Получени са нови резултати за разпределението на енергията, получени в нехомогенния случай (с приложено електрическо поле).

9. Karaivanova A. (2010), Quasi-Monte Carlo Methods for Some Linear Algebra Problems. Convergence and Complexity, *Serdica Journal of Computing*, **4** (2010), pp. 58-72, ISSN: 1312-6555

Конструирани са и са изследвани квази-Монте Карло алгоритми за решаване на системи линейни уравнения, намиране на екстремални собствени стойности на големи разреждени матрици и обръщане на матрици.

С цел изследване на сходимостта на квази-Монте Карло алгоритмите за разглежданите задачи са преформулирани в термините на интегрални уравнения с подходящо избрани ядра и области. Това преформулиране позволява да се използва неравенството на Коксма-Хлавка при анализирането на сходимостта на разглежданите

алгоритми. Теоретично и с числени експерименти е показано, че използването на квазислучайните редици подобрява скоростта на сходимост на съответните Монте Карло алгоритми. За всеки един от разгледаните алгоритми е пресметната изчислителната сложност, която има един и същи порядък за съответстващите си Монте Карло и квази-Монте Карло алгоритми. Намалването на времето за пресмятане при квази-Монте Карло реализациите се дължи не само на подобрената скорост на сходимост, но и на използването на бързи генератори на квазислучайни числа.

10. Karaivanova A., E. Atanassov, T. Gurov, S. Ivanovska, and M. Durchova (2010), Parallel Quasi-Random Applications on Heterogeneous Grid, *Journal of Scalable Computing: Practice and Experience (SCPE)*, Vol. 11, no.1, **2010**, pp.73-80, ISSN 1895-1767.

В работата е представен анализ на грешката и на изпълнението на квази-Монте Карло алгоритми за решаване на многомерни интегрални върху хетерогенен гريد с използване на MPI. Изчислителният гريد е потенциално хетерогенна изчислителна среда, и потребителят не познава спецификата на използваната архитектура. Следователно, паралелните алгоритми трябва да са адаптируеми към хетерогенността, като е осигурено автоматично балансиране на натоварването. Монте Карло методите могат ефективно да работят в такава среда при наличие на паралелни генератори на псевдослучайни числа. Използването на квази-Монте Карло алгоритми е свързано с повече трудности. И в двата случая ефективното изпълнение на алгоритмите зависи от функционалността на пакетите за генериране на псевдослучайни или квазислучайни числа. В работата е предложена ефективна паралелна реализация на редицата на Собол в гريد среда и са показани числени експерименти върху хетерогенен гريد. Постигането на висока паралелна ефективност е свързано с използването на специална гريد услуга, наречена Job Track Service (JTS), която осигурява ефективно управление на достъпните изчислителни ресурси чрез резервации.

11. E. Atanassov, S. Ivanovska and A. Karaivanova, Tuning the Generation of Sobol Sequence with Owen Scrambling, *LNCS 5910*, 2010, pp. 459-466, ISSN 0302-9743.

Има различни варианти на метода за разбъркване на квазислучайните редици чрез цифрова пермутация, които се основават на различните дефиниции на пермутациите, например предложените от Оуен, Тезука и Матушек. Методът на Оуен, който може да се приложи към всички редици, е единственият, който запазва дискрепанса на оригиналната редица, обаче изисква твърде много памет и пресмятания, поради което в литературата са известни само опростени версии, които (есествено) влошават дискрепанса. В тази статия е предложен *алгоритъм за генериране на редица на Собол с разбъркване на Оуен върху графични карти за високопроизводителни пресмятания (GPUs)*, и е тестван за различни размерности на редицата, при което времето за генериране на разбърканата редица е равно на времето за генериране на оригиналната редица върху CPU (т.е., без GPU). Всяка от използваните 4 карти NVIDIA GTX295 се разпознава софтуерно като 2 графични устройства (dual cards), при което се получават 480 ядра или общо 1920 ядра. Отработена е паралелната работа върху тях, както с използването на MPI, така и с използване на софтуера за размяна на съобщения ZeroMQ, който дава по-голяма свобода за комбиниране на хетерогенни ресурси.

12. D. Syrakov, M. Prodanova, K. Ganey, N. Miloshev, E. Atanassov, T. Gurov, and A. Karaivanova

(2009), Grid Computing for Multi-Scale Atmospheric Composition Modeling for the Balkan Region, *Journal of International Scientific Publication: Ecology&Safety*, Vol.3, Part 1, **2009**, pp. 4-21, ISSN: 1313-2563

Подробните изследвания на състава на атмосферата изискват провеждането на многонивови числени експерименти, които да изяснят взаимодействието между процесите на различни нива, но също така да прецизират изискванията за входните данни (емисии, гранични условия, различни скали). Трябва да се съобразят моделните интерфейси за различните скали: от синоптичната през мезо- до локалната скала. Накратко казано, трябва да бъдат проведени обширни изследвания на чувствителността, съобразени с параметрите и настройката на модела – предвестник на ансамблови прогнози от единичен модел.

Извършването на обширни симулации от този вид със съвременните сложни числени модели очевидно изисква значителни компютърни ресурси. Областта на грид пресмятанията се развива много активно напоследък, което я прави много подходяща за решаване на големи задачи, нерешими доскоро. Разработена е грид-приложима версия на моделите.

Настоящата статия представя задачи в областта на околната среда, които са разработени напоследък, тествани и оформени като грид приложения.

13. I. T. Dimov, B. Philippe, A. Karaivanova, C. Weinbrauch, Robustness and Applicability of Markov Chain Monte Carlo Algorithms for Eigenvalue Problems, *Journal of Applied Mathematical Modelling* **32**, 2008, pp. 1511-1529.

В работата [DPKW] се анализира приложимостта и робастността на алгоритми от тип Монте Карло с вериги на Марков за приближено решаване на задачата за собствени стойности. Разглежда се почти оптимален Монте Карло алгоритъм. Анализирани са двете компоненти на грешката, наричани систематична и вероятна грешки. Показано е, че стойностите на двете грешки могат да бъдат контролирани независимо чрез различни параметри на алгоритъма. Получени са достатъчни условия за конструиране на робастен и интерполационен Монте Карло алгоритъм. Конструиран е интерполационен Монте Карло алгоритъм за случая на стохастични матрици. Голям брой числени експерименти с големи разреждени матрици потвърждават експериментално теоретичните резултати за систематичната и вероятна грешки. Изследвана е и зависимостта на вероятната грешка от балансираността на матрицата.

14. E. Atanassov, T. Gurov, A. Karaivanova, "Ultra-fast semiconductor carrier transport simulation on the grid", *LSSC 2007*, LNCS **4818**, Springer-Verlag-Berlin-heidelberg, pp. 461-469, **2008**.

Статията разглежда симулиране на свръхбърз пренос на електрони при използване на съвременните Грид технологии. След кратко изложение на задачата и използваните методи, е обоснована необходимостта от използване на Грид, като са изложени специфичните изисквания за грид изпълнение на квази-Монте Карло алгоритмите. Описана е използваната за експериментите Грид инфраструктура, както и необходимите Грид услуги за ефективна симулация. Представена е схема за Грид изпълнение и резултати от числените експерименти за нехомогенния случай на задачата с приложено електрично поле.

15. A. Karaivanova, H. Chi, T. Gurov, Quasirandom Walks on Balls using c.u.d. sequences, NMA2006 (T. Boyanov et al., Eds.), LNCS **4310**, Springer, 2007, pp. 165-172.

В тази работа е описан един нов вариант на метода “случайно блуждаене по кълба”, а именно квазислучайно блуждаене с използване на специални редици, наречени напълно равномерно разпределени редици (*completely uniformly distributed*), за които често се използва съкращението *s.u.d.* Този подход е нов при приближеното решаване на елиптични гранични задачи и води до подобрена сходимост в сравнение с вариантите, използващи псевдослучайни числа и класически квазислучайни редици от типа на Холтън, Собол и Фор. Направена е теоретична обосновка на подобрението в сходимостта. Представени са числени резултати от тестови задачи, илюстриращи подобрената сходимост.

16. **A. Karaivanova** and N. Simonov, A Quasi-Monte Carlo Methods for Investigating Electrostatic Properties of Organic Pollutant Molecules in Solvent, *LSSC'05, LNCS 3743*, Springer, 2006, 172-180.

В тази работа се разглежда задачата за пресмятане на електростатични характеристики на органични молекули в разтворител. Математическият модел включва решаване на две различни уравнения (уравнение на Поасон в неизпъкнала област  $G$  и уравнение на Лаплас в  $R^3 \setminus (G \cup \partial G)$ ), свързани с гранични условия, които осигуряват непрекъснатост на решението. При това, в молекулярната електростатика не е нужно да се пресмята цялото решение, обикновено трябва да се пресметнат стойности на електростатичния потенциал и на електрическото поле в определени точки. По тази причина Монте Карло методите са успешна алтернатива на детерминистичните методи за решаване на такива елиптични гранични задачи.

Трябва да се отбележи, обаче, че Монте Карло методите са добре развити за уравнения с постоянни коефициенти и класически гранични условия. Задачата, която се разглежда, изисква нови методи – в последните 3 години бяха предложени различни подходи, например комбинация от случайно блуждаене по сфери, случайно блуждаене в подобласти и апроксимация на граничните условия с крайни разлики. Тъй като ефективността на случайното блуждаене зависи съществено от плътността на заряда извън молекулата, авторите на статията в предишна своя работа предложиха алгоритъм, включващ случайно блуждаене по границата  $\partial G$  за изпъкнала  $G$ , и специална квази-Монте Карло модификация на алгоритъма, която води до подобряване на скоростта на сходимост. В [6] авторите продължават изследването на квази-случайното блуждаене по границата за задачи от молекулярната електростатика за случая на неизпъкнала област  $G$ . Предложени са два варианта на алгоритъма – с разклоняващи се вериги на Марков и със случаен избор на една от пресечните точки. Доказано е, че за области с ниска вероятност за много пресечни точки, Монте Карло и квази-Монте Карло блуждаенето по границата работят много ефективно.

17. E. Atanassov, T. Gurov, A. Karaivanova, M. Nedjalkov, Monte Carlo Grid Application for Electron Transport, *ICCS2006* (V.N. Alexandrov et al., Eds.), *LNCS 3993*, Springer, 2006: 616-623.

В тази работа е описана първата завършена версия на Монте Карло грид-приложение, наречено от авторите **SALUTE** (**S**tochastic **A**lgorithms for **U**ltra-fast **T**ransport in **s**emiconductors), която включва няколко стохастични алгоритъма от тип Монте Карло за изследване на ултра-бърз транспорт в полупроводници, графичен интерфейс и схема за изпълнение. Физическият модел включва фемтосекунден релаксационен процес на оптически възбудени електрони, които взаимодействат с фонони в еднолентов полупроводник. За квантово кинетичен модел на разглеждания процес се използва

уравнението на Бъркър и Фери, като е разгледан случая без приложено електрично поле. За числено решаване на различните варианти на уравнението се използват Монте Карло алгоритми. Изследвана е изчислителната сложност на алгоритмите, и са предложени различни способи за изпълнение върху Грид с цел максимално натоварване. Описана е схема за пресмятания върху грид-инфраструктурата в Югоизточна Европа. Показани са резултати от симулации върху грид за еднолентов проводник и квантова жица без приложено електрично поле (за еволюционно време 200 фемтосекунди).

18. V. Alexandrov, **A. Karaivanova**, Finding the Smallest Eigenvalue by the Inverse Monte Carlo Method with Refinement, *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 3516, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 766—774, 2005.

Задачата за намиране на **най-малката собствена стойност** на квадратна матрица  $A$  от ред  $n$  е изчислително сложна задача. Най-често използвания детерминистичен метод за решаване на тази задача е *Обратния степенен метод*, който използва LU-разлагане на матрицата  $A$  и пряко и обратно решаване на съответната система на всяка итерация. Алтернатива на този метод е *Резолвентния Монте Карло метод*, който използва разлагане на резолвентната матрица  $[I - \alpha A]^{-m}$  в ред и случайно блуждаене по елементите на матрицата  $A$ . Това води до съществено намаляване на изчислителната сложност, но резолвентният метод има много ограничения за използване и бавна сходимост. В тази статия се предлага един нов метод, който включва бърз Монте Карло метод за намиране на приближение на обратната матрица, детерминистична процедура за подобряване на получената апроксимация (ако е необходимо), и Монте Карло вариант на степенния метод. По този начин се постига компромис между изчислителната сложност на обратния степенен метод и ограниченията за използване на резолвентния Монте Карло метод. Разработени са квази-Монте Карло варианти на Монте Карло процедурите, включени в метода. Създадени са алгоритми за паралелна реализация на метода. Направени са числени експерименти за точността и паралелната ефективност.

19. S. Ivanovska, E. Atanassov, and **A. Karaivanova**, A Superconvergent Monte Carlo Method for Multiple Integrals on the Grid, *Lecture Notes in Computer Science*, Vol. 3516, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, pp. 735—742, 2005.

В статията е предложен и изследван нов суперсходящ метод за решаване на многомерни интеграли. Методът се явява естествено развитие на метода “importance separation” (публикуван в предишни работи на авторите) за решаване на многомерни интеграли, който комбинира идеята за разделяне на областта на интегриране на равномерно малки подобласти с подхода на Кан за избор на преходна плътност в съответната област. В новия метод допълнително се прилага полиномиална интерполация в подобластите. Направен е анализ на стохастичната грешка. Числените резултати за моделна задача потвърждават теоретичните резултати за грешката. Сравнени са два варианта на метода – Монте Карло и квази-Монте Карло, използващ редиците на Соболев и Холтън.

В работата са представени и резултати от паралелна реализация на този алгоритъм, получени върху хетерогенен грид с използване на MPI, състоящ се от няколко персонални компютъра с процесори на Intel Pentium IV и процесори на Motorola G4. Резултатите показват висока паралелна ефективност. Предложената паралелна версия се състои в разпределяне

на пресмятанята за получените подобласти, след разбиването на областта на интегриране на равномерно малки подобласти, между процесорите на гريد-системата. Въпреки тривиалността си, този подход е свързан със значителни трудности по отношение на програмната си реализация. От друга страна минималното количество данни, което се обменя между процесорите, е в основата на получената висока паралелна ефективност на алгоритъма. Този подход се прилага успешно при решаване на квантово кинетичното уравнение – работата продължава.

20. Karaivanova A., M. Mascagni, N. Simonov (2004), *Parallel Quasirandom Walks on the Boundary*, *Monte Carlo Methods and Applications*, Vol. **10**, No. 3-4: 311-320.

Монте Карло методът „случайно блуждаене по границата” се използва успешно за решаване на гранични задачи. Този метод има значителни предимства в сравнение със случайното блуждаене по сфери, кълба или върху мрежа, когато се решава външната задача на Дирихле или Нойман, или когато искаме да пресметнем решението в произволен брой точки използвайки едно случайно блуждаене.

В тази статия си поставяме две цели:

- Да се повиши скоростта на сходимост чрез използване на квазислучайни редици вместо псевдослучайни числа за конструиране на блуждаенето по границата,
- Да се направи ефективна паралелна реализация на този метод върху кълстер работни станции с използване на MPI.

При паралелната версия за различните процесори са използвани непресичащи се непрекъснати блокове от квазислучайни числа, извлечени от избраната редица. Представени са числени експерименти, потвърждаващи повишената скорост на сходимост и добрата паралелна ефективност на метода.

21. Rasulov, A. Karaivanova, M. Mascagni (2004), *Quasirandom Sequences in Branching Random Walks*, *Monte Carlo Methods and Applications*, Vol. **10**, No. 3-4, 551-558.

В работата се разглежда гранична задача на Нойман за нелинейно уравнение на Хелмхолц. Като се използва формулата на Грийн, задачата се свежда до решаване на нелинейно интегрално уравнение с полиномиална нелинейност. Това уравнение може да се реши числено чрез Монте Карло метод, основан на разклоняващи се случайни блуждания в специално дефинирани области, като параметрите на разклоняващия се процес зависят от коефициентите на интегралното уравнение. В тази работа ние изследваме свойствата на този метод, когато се използват квазислучайни редици за конструирането на разклоняващите се процеси. Получени са теоретични оценки и са представени резултати от числени експерименти с моделна задача.

22. S. Ivanovska, A. Karaivanova (2004), “Parallel Importance Separation for Multiple Integrals and Integral Equations”, *Computational Science-ICCS2004* (Bubak, Dick van Albada, Sloot, Dongara Eds.), Springer LNCS **3039**: 499-506. **(IF 0.513)**

В тази работа е представен анализ на грешката и изпълнението на метода „разделяне по важност” за пресмятане на интеграли и интегрални уравнения. Самият метод е описан в предишна работа на авторите, тук се обобщават резултатите и се сравняват с обикновения Монте Карло и метода на съществената извадка.

Конструирана е паралелна версия и са представени числени експерименти върху кълстер с използване на MPI.

23. M. Mascagni, A. Karaivanova, C. Hwang (2004), "Quasi-Monte Carlo Methods for Elliptic BVPs", *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2002*, Springer, (H. Niederreiter, Ed.):345-356.

В статията са представени и анализирани квази-Монте Карло методи за решаване на елиптични гранични задачи. Разгледани са два подхода: блуждаене по мрежа и блуждаене по кълба. Първият използва дискретизация на задачата върху мрежа и решава системата линейни алгебрични уравнения, която апроксимира дадената задача. Вторият подход използва локално интегрално представяне на решението и води до случайно блуждаене по сфери (в двумерния случай) и по кълба (в тримерния случай). Тествани са различни стратегии за използване на квазислучайни числа за генериране на квазислучайно блуждаене по мрежа, сфери и кълба. Намерени са теоретични оценки за грешката и са показани числени експерименти с моделни елиптични гранични задачи в двумерния и тримерния случай. Теоретично и експериментално са сравнени скоростта на сходимост и изчислителната сложност на квази-МКМ и съответните Монте Карло методи. Квази-Монте Карло методите запазват предимствата на Монте Карло за решаване на задачи в сложни области и показват леко подобрение на скоростта на сходимост.

24. A.Karaivanova, M.Mascagni, N.Simonov (2004), "Solving BVPs using quasirandom walks on the boundary", *Large-Scale Scientific Computing* (I. Lirkov, S. Margenov, J. Wasniewski and P. Yalamov Eds.), Springer LNCS **2907**: 162-169. **(IF 0.513)**

В тази работа се разглежда задачата за пресмятане на електростатичен потенциал във вътрешността на компактен диелектрик, заобиколен от друга диелектрична среда. При предположение, че границата е достатъчно гладка и има само точкови източници вътре в областта, решението може да се представи в интегрална форма, и задачата да се преформулира като решаване интегрално уравнение. С цел ускоряване на сходимостта интегралното уравнение се параметризира и аналитично се продължава решението, представено в ред на Нойман, извън спектъра на интегралния оператор. Трансформираният ред има геометрична скорост на сходимост. За числено решаване на задачата се използва Монте Карло метод „блуждаене по границата“. В работата е предложен квази-Монте Карло вариант на метода. За целта при симулиране на направлението на новата точка от блуждаенето вместо обичайното използване на метода на селекцията, се използва метод на директното симулиране. Представени са резултати от числени експерименти, които показват леко подобрение на квазислучайния вариант в сравнение с Монте Карло.

25. V. Alexandrov, I. Dimov, A. Karaivanova, C.J.Tan (2003), "Parallel Monte Carlo Algorithms for Information retrieval", *Mathematics and Computers in Simulation*, Elsevier, **62**:289-295. **(IF 0.812)**

Във всяко приложение за обработка на данни е необходимо да се прави извличане на изображение и текст. Този процес става съществен с нарастването на интернет и цифровите библиотеки. Представеният подход се основава на латентно семантично индексване и на съответната член-по-документ матрица, предложена от някои автори. Вместо използването на детерминистични методи за намиране на търсения брой на първите „k“ сингулярни

триплетите, ние предлагаме стохастичен подход. Първо, ние използваме Монте Карло метод за получаване на извадка и конструиране на много по-малка документна матрица, от която получаваме първите  $k$  триплетите с детерминистични методи. Второ, ние използваме паралелен Монте Карло метод за приближено намиране на най-големите собствени стойности на редуцираната матрица.

Алгоритмите са реализирани върху клъстер от работни станции с MPI и са показани резултати от извличане на текст от уеб документи и сравнение на предложените методи с известните от литературата.

26. Dimov I., A. Karaivanova, R. Georgieva, S. Ivanovska (2003), "Parallel Importance Separation and Adaptive Monte Carlo Algorithms for Multiple Integrals", *Numerical Methods and Applications*, (I. Dimov, I. Lirkov, S. Margenov and Z. Zlatev Eds.), Springer LNCS **2542**: 99-107. **(IF 0.512)**

В тази работа е представен адаптивен Монте Карло метод, основан на метода „важно разделяне“, който комбинира идеята за разделяне на областта на интегриране на равномерно малки подобласти и подхода на Кан за съществената извадка. Направен е обзор на адаптивните методи. Анализирани са грешката на предложения метод и резултатите са сравнени с обикновения Монте Карло и метода на съществената извадка. Представени са паралелни реализации на адаптивния метод и на метода на разделяне по важност. Показани са числени експерименти върху клъстер от работни станции с използване на MPI.

27. M. Mascagni, A. Karaivanova (2003), "A Monte Carlo Approach for Finding More than One Eigenpair", *Numerical Methods and Applications*, (I. Dimov, I. Lirkov, S. Margenov and Z. Zlatev Eds.), Springer LNCS **2542**: 123-131. **(IF 0.512)**

Методът Монте Карло се използва успешно за приближено пресмятане на екстремалните (най-голямата и най-малката) собствени стойности. В тази работа предлагаме метод за пресмятане и на собствените вектори. Методът, който е предложен се основава на прилагането на ергодичната теорема, и числените резултати са сравнение с тези от Монте Карло версията на степенния метод. Изследвана е също и задачата за пресмятане на повече от една собствена двойка, като предложеният метод комбинира Монте Карло и дефлационни техники.

28. Mascagni M., A. Karaivanova (2002), "A Parallel Quasi-Monte Carlo Method for Solving Systems of Linear Equations", *Springer Lecture Notes in Computer Science*, **2330**, (Peter M.A. Soot, C.J.Kenneth Tan, Jack J. Dongarra, Alfons G. Hoekstra), part II: 598-608. **(IF 0.415)**

В тази работа е представен паралелен Монте Карло метод за решаване на системи линейни алгебрични уравнения с разреждени матрици. При паралелизацията се използват непресичащи се блокове от квазислучайни числа, извлечени от дадена квазислучайна редица. В този случай паралелната ефективност не е за сметка на по-малката надеждност на резултата. Подобни резултати за паралелната ефективност са публикувани при пресмятане на собствените стойности с квази-Монте Карло метод. Но задачата, разглеждана тук, е по-сложна – алгоритъмът използва не само  $s$ -мерна редица, но и нейните  $k$ -мерни проекции ( $k=1, 2, \dots, s-1$ ). Представени са числени експерименти с разреждени матрици, генерирани със случаен генератор. Използваните квазислучайни редици са с



размерност по-малка от 10. Сравнена е паралелната ефективност при използване на редици на Соболев, Холтърн и Фор и псевдослучайни числа.

29. Mascagni M., A. Karaivanova (2002), "A Parallel Quasi-Monte Carlo Method for Computing Extremal Eigenvalues", *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2000*, Springer, (K.-T. Fang, F. J. Hickernell, H. Niederreiter, Eds.): 369-380.

В работата се изследва квази-Монте Карло метод за пресмятане на екстремални собствени стойности на дадена матрица. Получена е теоретична оценка на грешката и са представени резултатите от числени експерименти с разреждени матрици при използване на три различни квазислучайни редици: на Соболев, Холтърн и Фор. Резултатите показват:

- Квази-Монте Карло вариантите водят до подобрене на скоростта на сходимост и големината на грешката;
- Високата паралелна ефективност, характерна за Монте Карло подхода, се запазва и в квази-Монте Карло подхода.

30. Dimov I., V. Alexandrov, A. Karaivanova (2001), "Resolvent Monte Carlo Methods for Linear Algebra Problems", *Mathematics and Computers in Simulations*, **55**: 25-36. **(IF 0.960)**

В работата е предложен общ Монте Карло подход, основан на използването на резолвентната матрица, за решаване на задачи на линейната алгебра (решаване на СЛАУ, обръщане на матрици, намиране на екстремални собствени стойности). Доказано е, че резолвентният метод ускорява скоростта на сходимост на алгоритмите, когато съответния ред на Нойман не е сходящ или има бавна сходимост. Пресметната е изчислителната сложност на алгоритмите и е сравнена с тази на съответните детерминистични алгоритми. Показано е, че резолвентните методи имат оптимална сложност за големи разреждени матрици без специална структура. Теоретично и експериментално е показано, че резолвентните алгоритми имат същата висока паралелна ефективност, както обикновените итеративни Монте Карло алгоритми.

31. Karaivanova A., I. Dimov, S. Ivanovska (2001), "A Quasi-Monte Carlo Method for Integration with Improved Convergence", *Springer Lecture Notes in Computer Science*, (S. Margenov, J. Wasniewski, P. Yalamov, Eds.) **2179**: 158-165. **(IF 0.872)**

Конструиран е квази-Монте Карло метод за приближено пресмятане на интеграли, който използва разделяне по важност. Представени са теоретични оценки за грешката и скоростта на сходимост. Новият метод, обикновеният квази-Монте Карло метод и методът на претеглената равномерна извадка са реализирани с редиците на Соболев, Холтърн и Фор и показва по-добра точност в сравнение с тях, както и в сравнение с реализациите с псевдослучайни числа.

32. Karaivanova A., R. Georgieva (2001), "Solving Systems of Linear Algebraic Systems Using Quasirandom Sequences", *Springer Lecture Notes in Computer Science*, (S. Margenov, J. Wasniewski, P. Yalamov, Eds.) **2179**: 166-174. **(IF 0.872)**

В тази работа е анализиран квази-Монте Карло метод за решаване на системи линейни алгебрични уравнения. Изследвана е точността и скоростта на сходимост. Получена е теоретична оценка за грешката. Представени са числени експерименти, които показват по-добра сходимост в сравнение с Монте Карло метода.

46. A.Karaivanova and S.Ivanovska, Matrix Computations Using Quasi-Monte Carlo with Scrambling, *Proceeding of 33rd International Convention MIPRO/GVS 2010*, pp. 249-252, 2010, ISBN 978-953-233-051-9.

Квази-Монте Карло методите са мощно средство за ускоряване сходимостта на Монте Карло методите. Нещо повече, квази-Монте Карло методите дават по-гладка сходимост с увеличаването на дължината на траекторията, което е важно особено при пресмятане на собствени стойности. В същото време Монте Карло и квази-Монте Карло имат една и съща изчислителна сложност. Недостатък на квази-Монте Карло е липсата на практическа оценка на грешката поради факта, че е трудно да се използва оценката от неравенството на Коксма-Хлавка. Този недостатък може да се преодолее чрез рандомизиране (разбъркване) на използваната редица. Разбъркването също осигурява естествен начин за паралелизация на редицата. В тази статия се изследват варианти на квази-Монте Карло алгоритмите за матрични пресмятания с използване на разбъркани редици. Кодовете, реализиращи разработените алгоритми, са тествани върху Грид клъстерите на ИПОИ-БАН.

48. D. Syrakov, M. Prodanova, K. Ganev, N. Miloshev, E. Atanassov, T. Gurov, and A. Karaivanova (2009), The Grid Computing - Powerful Tool for Multi-Scale Atmospheric Composition Modeling, *Proceeding of 9th International Multidisciplinary Scientific GeoConference, SGEM2009*, Vol. II, 2009, pp. 365-372, ISBN: 954918181-2.

В тази работа са описани две грид приложения, работещи върху SEE-GRID-SCI инфраструктурата и са представени резултати от пресмятане на обмена на замърсяването по въздуха между две страни на Балканите (пресмятанията са за България, Румъния и Гърция), и от пресмятане на екстремалните замърсявания на въздуха в град Стара Загора от ТЕЦ „Марица Изток“. Обоснована е необходимостта от използване на грид технологии и са дадени параметрите на използваната инфраструктура.

49. E. Atanassov, A. Karaivanova, T. Gurov, S. Ivanovska and M. Durchova, Using Sobol Sequence in Grid Environment, *MIPRO/GVS 2009*, ISBN **978-953-233-044-1**, pp. 290-294

В тази работа е представен анализ на грешката и изпълнението на грид-приложими квази-Монте Карло алгоритми с намалена дисперсия, с използване на редицата на Собол. Представена е редицата на Собол и алгоритъм за генериране на разместена (разбъркана) редица, подходящ за грид приложения. Редицата е тествана със задачи числено интегриране с размерност 100 върху хетерогенен грид. Представени са резултати от паралелно изпълнение върху 20 процесорни ядра от клъстер BG04-ACAD и 32 процесорни ядра от клъстер BG03-NGCC едновременно. Паралелната ефективност се измерва със специално дефиниран параметър  $T_{opt}/T_m$ , където  $T_{opt}$  е теоретично оптималното време за изпълнение, а  $T_m$  е измереното. Точността на квази-Монте Карло алгоритъма е приблизително същата, както тази на обикновения Монте Карло метод (поради високата ефективна размерност), паралелната ефективност с редицата на Собол е малко по-добра,

но основната разлика е времето за изпълнение – квази-Монте Карло алгоритъма е 12 пъти по-бърз поради качествата на алгоритъма за генерация на редица на Собол, предложен в статията.

50. A.Karaivanova, H.Chi, T. Gurov, Error Analysis of Quasirandom Walks on Balls, *MIPRO/GVS 2009*, ISBN **978-953-233-044-1**, pp. 285-289.

В тази работа се разглежда приближено намиране на решението на 3-мерна елиптична гранична задача посредством квазислучайни блуждаения по кълба с разбъркани редици на Холтърн. След кратко представяне на задачата и Монте Карло метода, следва описание на методите за разбъркване на квазислучайни редици и анализ на известните подходи за блуждаене по кълба (псевдослучайни генератори, хибридни редици, напълно равномерни редици на Корабов) и предложение за използване на редица на Холтърн с специалното разбъркване на Маскани и Чи. Представен е алгоритъм за практическа оценка на грешката по време на пресмятанятията. Показани са числени резултати.

51. Karaivanova A., E. Atanassov, T. Gurov, R. Stevanovic, K. Skala (2009), "Variance reduction MCMs with application in environmental studies: Sensitivity analysis", *American Institute of Physics Conference Proceedings Series 2009*, vol. 1067, pp. 549-558, ISBN 978-0-7354-0598-01,

Изследва се чувствителността на клас Монте Карло методи с намалена дисперсия за пресмятане на многомерни интегрални към генератори на случайни, псевдослучайни и квазислучайни числа, когато за моделиране на случайната величина се използва метод на селекцията. Това изследване е основа за разработване на Грид приложение за анализ на чувствителността на модели в областта на екологията. Изследвани са методите важна извадка, важна извадка с изглаждане, претеглена равномерна извадка и обикновен Монте Карло. Сравнени са резултатите за тестови интегрални с различни генератори на случайни, псевдослучайни и квазислучайни числа.

52. R. Stevanovic, K. Skala, A. Karaivanova, E. Atanassov, T. Gurov, "A True Random Number Service and its Applications", *Proceedings of MIPRO 2008/GVS*, **2008**, pp. 243-248.

Представен е обзор на генераторите на случайни, псевдослучайни и квазислучайни числа, които се използват в съвременните научни изследвания, като специално е разгледана генерацията на "истински" случайни числа посредством устройството Quantum Random Bits Generator (QRBG). Разработен е специален интерфейс към устройството-Quantum Random Bits Generator Service (QRBGS) – чрез който числата са достъпни онлайн и с известно качество. Изследвана е чувствителността на четири алгоритъма за числено интегриране към различните генератори, представени са резултати от направените експерименти за тестови интегрални, които показват предимствата на квазислучайните редици. Изследвана е и чувствителността на един алгоритъм от Грид приложението SALUTE, където истинските случайни числа показват по-добри резултати.

53. E. Atanassov, R. Georgieva, T. Gurov, S. Ivanovska, A. Karaivanova, and M. Nedjalkov (2007), "New Algorithms in the Grid Application SALUTE", *Proceedings of MIPRO/GVS 2007*, ISBN 978-953-233-032-8, pp. 217-222..

В работата [AGGIKN07] са описани два нови алгоритъма, включени в грид-приложението SALUTE: хибриден алгоритъм и алгоритъм, основан на разделяне на областта на интегриране по важност. Алгоритмите са разработени с цел решаване на задачата за квантов транспорт на електрони при по-големи еволюционни времена, тъй като в този случай съществуващите Монте Карло методи не дават достатъчно добра точност (поради експоненциалното нарастване на дисперсията на случайната величина). Двата нови алгоритъма използват специални техники за намаляване на дисперсията (чрез използване на квази случайни редици, и чрез специално разделяне на областта, основано на априорна информация). Работата по тази задача продължава с числени експерименти.

*Статията получи наградата за най-добра научна статия на 30 юбилеен конгрес MIPRO в Хърватска през 2007 г., който включва 8 конференции (приложено е копие от грамотата).*

54. E. Atanassov, T. Gurov, A. Karaivanova, SALUTE Application for Quantum Transport – New Grid Implementation Scheme, *Proceedings of the Spanish e-Science Grid Conference*, 1-2 March 2007, Madrid, Spain, ISBN: 987-84-7834-544-1, NIPO: 654-07-015-9, pp.23-32.

В работата е описана новата схема за изпълнението на грид-приложението SALUTE. Развитието на схемата за грид пресмятания се мотивира от развитието на грид-инфраструктурата. В новата схема е включено използването на новите грид услуги AMGA и FTS, достъпни в новата версия на грид мидълуеър gLite, инсталиран на грид-сайтовете в SEEGRID-инфраструктурата, като по този начин стана възможно включването на оценка на няколко нови физически параметъра, което води до увеличаване на обема данни, който трябва да се генерира, съхранява, обработва и визуализира. Наличието на по-големи изчислителни ресурси позволи увеличаването на пространствената резолюция на всички графики, илюстриращи изследваните физически явления.

55. E. Atanassov, T. Gurov, **A. Karaivanova** and M. Nedjalkov, SALUTE – an MPI GRID Application, *Proceedings of the 28<sup>th</sup> MIPRO Convention*, 2005, Opatija, Croatia, ISBN 953-233-011-9, pp. 259—262, 2005.

В тази работа е описана пилотната версия на Грид-приложение, наречено от авторите **SALUTE (Stochastic ALgorithms for Ultra-fast Transport in sEmiconductors)**. Това приложение интегрира няколко стохастични алгоритъма от тип Монте Карло за изследване на ултра-бърз транспорт в полупроводници. Физическият модел включва фемтосекунден релаксационен процес на оптически възбудени електрони, които взаимодействат с фонони в еднолентов полупроводник. За квантово кинетичен модел на разглеждания процес се използва уравнението на Бъркър и Фери, като са разгледани два случая - със и без приложено електрично поле. За числено решаване на различните варианти на уравнението се използват. Основен проблем е експоненциалното нарастване на дисперсията с увеличаване на еволюционното време. В SALUTE този проблем е решен като са приложени различни техники за намаляване на дисперсията. Обоснована е нуждата от използване високопроизводителни изчислителни системи, включително Грид-системи. Показани са

резултати от експериментите върху Грид-сайтове със и без използване на MPI, за хомогенния случай на задачата с приложено електрично поле.

67. Е. Атанасов, Т. Гюров и А. Караиванова (2006), „Изчислителен Грид: структура и приложения“, *Списание „Автоматика и информатика“*, ISSN 0861-7562, 3/2006: 40-43.

Гридът е изчислителна инфраструктура, която осигурява съгласуван достъп до географски разпределени изчислителни ресурси и данни. В статията са описани основните софтуерни компоненти на грида (система за управление на натоварването, система за управление на данни, информационна система, система за проверка на потребителите, система за мониторинг) и архитектурата на грид-сайтовете (малки, средни и основни кълъстери). Направен е преглед на основните български приложения и накратко е описано грид-приложението SALUTE.