

## РЕЗЮМЕ НА НАУЧНИТЕ ПУБЛИКАЦИИ

на гл. ас. д-р Райна Георгиева,

представени за участие в конкурс за академичната длъжност „доцент“ в професионално направление 4.5. „Математика“, специалност 01.01.09 „Изчислителна математика (Монте Карло анализ на чувствителността и решаване на интегрални уравнения)“

Изискване	Научни публикации		Цитирания	
	общо (неповтарящи представените за придобиване на образователната и научната степен „доктор“)	в списания с импакт фактор или в специализирани международни издания	общо	в списания с импакт фактор или в специализирани международни издания
<b>ИИКТ-БАН</b>	<b>20</b>	<b>15</b>	<b>20</b>	<b>7</b>
<b>Изпълнение</b>	<b>20</b>	<b>16</b> (5 [4, 10, 12, 13, 17] в списания с импакт фактор и 11 [2, 3, 5, 6, 7, 8, 14, 15, 18, 19, 20] в специализирани международни издания)	<b>22</b>	<b>17</b> (10 [3, 6, 7, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18] в списания с импакт фактор и 7 [1, 2, 4, 5, 8, 19, 20] в специализирани международни издания)

Представените публикации за настоящия конкурс са фокусирани върху

- разработване на ефективни алгоритми Монте Карло (по отношение на грешка и изчислителна сложност), подходящи за осъществяване на анализ на чувствителността на математически модели в зависимост от характеристиките на моделната функция (гладкост, изчислителни особености, входни параметри с несъществено влияние върху колебанията на изходния резултат) [1, 2, 13, 15, 19];
- прилагане на разработените алгоритми за анализ на чувствителността на конкретни математически модели [3-18];
- разработване на ефективни алгоритми Монте Карло за решаване на интегрални уравнения [20].

Представените публикации за настоящия конкурс са публикувани в следните издания:

- *Computers and Mathematics with Applications*, Elsevier. IF (2012): 2.069. 5-year IF: 1.894. IF (2015): 1.398. 5-year IF: 1.873 [13]
- *Reliability Engineering and System Safety*, Elsevier. IF (2012): 1.901. 5-year IF: 2.441. IF (2015): 2.498. 5-year IF: 2.873 [12]
- *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier. IF (2011): 1.112. 5-year IF: 1.228. IF (2015): 1.328. 5-year IF: 1.294[10]
- *International Journal of Environment and Pollution*, Interscience Enterprises Ltd. IF (2010): 0.626. IF (2013/2014): 0.303. [4]
- *Central European Journal of Mathematics*, Springer. IF (2012): 0.405. IF (2014/2015): 0.578 [17]
- *Lecture Notes in Computer Science*, Springer. SJR (2012): 0.332, SJR (2013): 0.316, SJR (2014): 0.310 SJR (2015): 0.252 [2, 3, 5, 7, 14, 18, 19, 20]
- *AIP Conf. Proceedings*. SJR (2012): 0.161. SJR (2015): 0.198 [6, 8]

- *Procedia Social and Behavioral Sciences*, Elsevier. SJR (2010): 0.144, SJR (2015): 0.166 [1]
- *Springer Proceedings in Mathematics & Statistics*, Springer. SJR (2013): 0.111. SJR (2015): 0.161 [15]
- *BGSIAM Proceedings* [9, 11, 16]

Намерените цитирания на представените публикации са публикувани в следните издания:

- *Environmental Modelling and Software*, Elsevier. IF (2013): 4.538. IF (2015): 4.207. 5-year IF: 4.528 ([12, 15] цитират публикация [12])
- *Risk Analysis*, Blackwell Publishing Inc. IF (2012): 2.278. IF (2015): 2.225 ([16] цитира публикация [12])
- *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, Springer. IF (2013/2014): 2.673. IF (2014/2015): 2.086 ([7, 18] цитира публикации [10, 13])
- *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Wiley-Blackwell. IF (2013/2014): 1.542. IF (2015): 1.849 ([17] цитира публикация [12])
- *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Elsevier. IF (2015): 1.328. 5-year IF: 1.294 ([11] цитира публикация [10])
- *Journal of Artificial Societies and Social Simulation*, SimSoc Consortium. IF (2015): 1.733 ([6] цитира публикация [3])
- *Acta Polytechnica Hungarica*, Óbuda University, Hungarian Academy of Engineering and IEEE Hungary Section. IF (2013): 0.471. IF (2015): 0.544. 5-year IF: 0.613 ([14] цитира публикация [12])
- *Asia-Pacific Journal of Operational Research*, World Scientific Publishing Company. IF (2015): 0.425. 5-year IF: 0.438 ([3] цитира публикация [1])
- *Yi Qi Yi Biao Xue Bao/Chinese Journal of Scientific Instrument*. SJR (2014): 0.328. SJR (2015): 0.322 ([19] цитира публикация [13])
- *Materials Science Forum*, Trans Tech Publications Inc. SJR (2012): 0.261([1] цитира публикация [1])
- *Zhongguo Huanjing Kexue/China Environmental Science*, Tsing Hua University. SJR (2014): 0.159. SJR (2015): 0.185 ([8] цитира публикация [10])
- *Zhongguo Jixie Gongcheng/China Mechanical Engineering*, Chinese Mechanical Engineering Society. SJR (2012): 0.158. SJR (2015): 0.258 ([2] цитира публикация [1])
- *Journal of Computational Design and Engineering*, Elsevier ([5] цитира публикация [2])
- *Proc. of E-Health and Bioengineering Conference (EHB)*, IEEE ([20] цитира публикация [13])
- *TI Journals, World Applied Programming*, Technology Institute of Dadaab, Kenya ([4] цитира публикация [2])
- *Дисертация за присъждане на научната степен „Доктор на науките“*, Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“ ([10, 22] цитират публикации [10, 13])
- *Дисертация за присъждане на образователната и научната степен „Доктор“*, Пловдивски университет „Паисий Хилендарски“ ([9, 21] цитират публикации [10, 13])
- *Дисертация, защитена в чужбина* ([13] цитира публикация [12])

Резултатите, описани в представените публикации, са получени в рамките на 9 научноизследователски проекта, от които 2 международни и 7 национални (1 като ръководител):

- *Ефективни паралелни алгоритми за големи изчислителни задачи*, ФНИ, Договор #ФНИ И-02-20/2014 (Ръководител: Проф. дн Ив. Димов, от 2016 г. - проф. Ст. Фиданова, ИИКТ-БАН) [20]
- *Съвременните пресмятания в полза на иновацията (AComIn)*, “Капацитети” в 7-ма Рамкова програма на Европейската комисия (ЕК), “Научно-изследователски потенциал в конвергентните райони”, конкурс FP7-REGPOT-2012-2013-1, договор 316087, 2012 – 2015

- (Ръководител: Проф. дн Галя Ангелова, ИИКТ-БАН) [8, 18, 19]
- **Разработване и изследване на нови методи Монте Карло за моделиране на сложни системи**, НФНИ, Договор #ДМУ 03/61, 2011-2013 (Ръководител: Гл. ас. д-р Райна Георгиева, ИИКТ-БАН) [13, 14, 15, 18]
  - **Център за върхови научни постижения SuperCA++**, НФНИ, Договор #DCVP 02/1/2010 (Ръководител: Проф. дн Светозар Маргенов, ИИКТ-БАН) [2, 4, 5, 6, 7, 8, 11, 12, 13, 14, 17, 18]
  - **Ефективни Монте Карло методи за големи научно-изследователски задачи**, НФНИ, Договор #ДТК 02/44/2009 (Ръководител: Проф. дн Иван Димов, ИИКТ-БАН) [2, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 19]
  - **Монте Карло и квази-Монте Карло методи за анализ на чувствителността за големи математически модели**, НФНИ, Договор #ДО 02-215/2008 (Ръководител: Гл. асистент д-р София Ивановска, ИИКТ-БАН) [2, 3, 9, 10, 11, 12, 16, 17]
  - **Иновативни квази-Монте Карло пресмятания - среда, библиотеки, пилотни грид-приложения**, НФНИ, Договор #ДО 02-146/2008 (Ръководител: Доц. д-р Анета Караиванова, ИИКТ-БАН) [9]
  - **Център за върхови научни постижения SuperCA**, НФНИ, Договор #ДО 02-115/2008 (Ръководител: Проф. дн Светозар Маргенов, ИИКТ-БАН) [3, 10]
  - **Monte Carlo Sensitivity Studies of Environmental Security**, NATO Programme Security through Science, Collaborative Linkage Grant, PDD(ТC)-ESP.EAP.CLG 982641, 2007 - 2009, съвместен проект между Университета на Рединг, Великобритания, National Environmental Research Institute, Роскилде, Дания, и ИПОИ-БАН, София, България (Ръководител: проф. Иван Димов, основни изследователи: ст.н.с. П. ст. Емануил Атанасов, ИПОИ-БАН, проф. Захари Златев, NERI, Дания) [10]

Резултатите са представени на следните научни форуми:

- **Шестата международна конференция по Анализ на чувствителността на математически модели** (Sensitivity Analysis of Model Output, SAMO 2010), проведена в периода 19-22 юли 2010 г. в Милано, Италия. Конференцията е организирана от Centre for Research on Analysis and Systematic Use of Information (ELEUSI), Bocconi University, и Joint Research Centre (JRC) – European Commission [1, 12]
- **Седмата и осмата международна конференция по Числени методи и алгоритми** (NMA 2010, 2014), проведени съответно в периода 20-24 август 2010 г. и 2014 г. в Боровец, България. Конференцията е организирана от ИИКТ-БАН, ИМИ-БАН, Факултета по математика към СУ „Св. Климент Охридски“ със съдействието на Lecture Notes in Computer Science, Springer [2, 18, 20]
- **Седмата, осмата и деветата международна конференция по научни пресмятания за задачи с голяма размерност** (LSSC 2009, 2011, 2013), проведени съответно в периода 4-8 юни 2009 г., 6-10 юни 2011 г. и 3-7 юни 2013 г. в Созопол, България. Конференцията е организирана от секция „Научни пресмятания“ от ИИКТ-БАН [3, 5, 19]
- **Третата и петата международна конференция на Евроамериканския консорциум за насърчване на приложението на математиката в техническите и природните науки** (AMiTaNS 2011, 2013), проведени съответно в периода 20-25 юни 2011 г. и 24-29 юни 2013 г. в Албена, България. [6, 8]
- **Петата международна конференция по Числен анализ и приложения** (NAA 2012), проведена в периода 15-20 юни 2012 г. в Лозенец, България. Конференцията е организирана от секцията по Приложна математика и статистика към Русенския университет с подкрепата на Съюза на математиците в България, секция Русе [7, 14]
- **Четвъртия, петия и шестия годишен семинар на българската секция на SIAM** (BGSIAM 2009, 2010, 2011), проведени съответно 21-22 декември 2009 г., 20-21 декември 2010 г. и 21-22 декември 2011 г. в сградата на ИМИ-БАН [9, 11, 16]

## I. Методи Монте Карло за анализ на чувствителността на математически модели

Глобалните цели на анализа на чувствителността са следните: *а)* проверка и/или усъвършенстване на математическия модел; *б)* повишаване на надеждността на резултатите, получени с модела; *в)* идентифициране на параметри и процеси, които трябва да се проучат по-прецизно, защото резултатите от модела се влияят от малки пертурбации на тези параметри.

В настоящите изследвания е предложена схема за провеждане на анализ на чувствителността, която се състои от три важни компонента: *а)* избор на подходяща и ефективна техника за анализ на чувствителността в зависимост от характеристиките на модела (локален анализ, глобален анализ – скрининг методи; методи, основани на дисперсията; методи, основани на производната); *б)* избор на ефективни техники за генериране на случайни извадки; *в)* избор на надеждни стохастични алгоритми за приближеното пресмятане на индикаторите на чувствителността.

Най-широко използваните подходи за анализ на чувствителността са подходите, основани на дисперсията, тъй като те предоставят възможност не само за качествена, но и количествена класификация на входните параметри на даден математически модел в зависимост от степента им на влияние върху изходния резултат. Един от приложените подходи е методът на Соболев, чиято идея се състои в пресмятането на индикатори за чувствителността, представляващи частно на съответната частична дисперсия и пълната дисперсия<sup>1</sup>. Едно от предимствата на избрания подход за анализ на чувствителността е възможността да се пресметнат не само индексите от първи ред, но и индексите от по-висок ред, което носи информация за съвместния принос на входните параметри върху измененията на изходния резултат. Друго предимство е оптималната му изчислителна сложност, която е пропорционална на размерността на случайната извадка и на броя на параметрите. От математическа гледна точка, пресмятането на числените индикатори на чувствителността се свежда до приближено пресмятане на многомерни интеграли. С цел надеждна интерпретация на получените резултати за чувствителността на математическите модели се налага разработване на ефективни стохастични алгоритми за многомерно числено интегриране, съобразено с изчислителните особености на подинтегралните функции, описващи разглежданите математически модели, и характеристиките на избраните подходи за анализ на чувствителността.

### 1. Методи Монте Карло за числено интегриране

В публикация [1] е описана идеята на приложената адаптивна стратегия в алгоритъм Монте Карло за числено интегриране. Известно е, че адаптивните алгоритми са особено надеждни и ефективни при интегрирането на подинтегрални функции с изчислителни особености (например, производната от първи ред нараства много бързо). Съществуват различни адаптивни алгоритми Монте Карло в зависимост от стратегията за адаптиране. Конкретният адаптивен алгоритъм използва постериорна информация за дисперсията. Идеята се състои в следното: областта на интегриране се разделя първоначално на подобласти с равни обеми. Във всяка подобласт се пресмята приближената стойност на интеграла, както и съответстващата на тази оценка дисперсия. Подобластта с най-голяма дисперсия се разделя на  $2^d$  нови подобласти ( $d$  е размерността). Така получената информация за дисперсията се използва за нарастване на броя (сгъстяване) на случайните точки в съответната подобласт. Алгоритъмът спира, когато дисперсията във всички подобласти удовлетворява предварително зададена точност или е достигнат максимумът за нива на разделяне или брой подобласти. Адаптивният алгоритъм показва предимство пред обикновения алгоритъм Монте Карло по отношение на оценената относителна грешка (за фиксиран брой реализации) особено за подинтегрални функции с по-голяма размерност, но в общия случай и двата подхода са приложими в зависимост от функциите, техните размерности и изчислителните особености.

<sup>1</sup> Дисперсиите са дефинирани за случайни величини, определени от подинтегралната функция (която описва математическия модел), чиито входни параметри представляват равномерно разпределени случайни величини в съответния дефиниционен интервал.

В публикация [2] е предложен и изследван нов алгоритъм Монте Карло за числено интегриране, който използва редици от квазислучайни числа на Соболю. Тези редици са утвърдени като едни от най-надеждните за числено интегриране на гладни функции с не много висока ефективна размерност. Идеята на алгоритъма е оригиналните квазислучайни точки на Соболю да бъдат „изместени“ на достатъчно малко разстояние (радиус), така че новата точка (която е псевдослучайна) да лежи в същия елементарен подинтервал, както и оригиналната квазислучайна точка, за да се запази равномерната разпределеност на точките. „Изместването“ се реализира като псевдослучайната точка е избрана (равномерно разпределена) върху сферата с център съответната квазислучайна точка от редицата на Соболю. Разработеният алгоритъм обединява свойствата на два от най-добрите съществуващи генератори на случайни числа – SIMD oriented Fast Mersenne Twister (SFMT) за генериране на псевдослучайни числа, и квазислучайни редици на Соболю, за чието генериране е използвана реализация с код на Грей и направляващи числа, предложени от Джо и Куо. Реализациите на обикновен алгоритъм Монте Карло с тези два генератора са използвани за сравнение при изследването на ефективността на предложения алгоритъм. Проведени са числени експерименти за числено интегриране на тестови гладки и негладки подинтегрални функции.

Конструираният алгоритъм Монте Карло показва съществено предимство по отношение на относителната грешка за негладки подинтегрални функции в сравнение с другите два стохастични алгоритъма – по-малка относителната грешка дори при сравнително малка размерност на извадката. Това дава възможност за надеждно оценяване на съответната неизвестна величина, дори с малко на брой случайни точки. В случая на гладки функции предложеният алгоритъм се характеризира с относителна грешка, която има същия порядък, както и квази-Монте Карло алгоритъмът (с редици на Соболю), но демонстрира по-бърза сходимост в сравнение с алгоритъма с псевдослучайни числа.

За целите на анализа на чувствителността на математически модели са разработени още два алгоритъма Монте Карло, които представляват модификации на описания вече алгоритъм, използващи „изместени“ точки на Соболю, но те са описани в следващата секция заедно с приложението им.

## **2. Приложение на разработените алгоритми Монте Карло за анализ на чувствителността на математически модели**

### **2.1. Математически модел за пренос на замърсители във въздуха**

Основната цел на изследванията, чиито резултати са описани по-долу, е разработване и изследване на нов (количествен) механизъм за анализ на чувствителността на математически модел, описващ далечен пренос на замърсители във въздуха. За изследванията е избран т. нар. Унифициран Датски Ойлеров модел (Unified Danish Eulerian Model, UNI-DEM), разработен от д-р Захари Златев и негови колеги от Датския национален институт за изследване на околната среда. Пространствената област на модела включва цяла Европа, Средиземноморието, както и части от Азия и Африка. Моделът предоставя възможност за изследване във времето на концентрациите на основните типове замърсители (серни и азотни съединения, амоняк, амониеви йони, азот, свободни радикали, въглеродороди), което има значение за екологичната безопасност, селското стопанство и здравеопазването. Избраният математически модел описва по адекватен начин протичащите физични (адвекция, дифузия, депозиция, вредните емисии) и химични процеси, които съпровождат преноса на замърсители във въздуха. Химичните реакции са взети от схемата CBM-IV.

#### **2.1.1. Генериране на данните от математически модели с цел анализ на чувствителността и изследване на производителността на алгоритмите върху съвременни изчислителни архитектури**

За целите на анализа на чувствителността е разработена специализирана версия на модела UNI-

DEM, означена със SA-DEM. Тази версия на модела дава възможност като изходен резултат да се получат отношенията на средномесечните концентрации на замърсителите във въздуха за различни пертурбационни коефициенти, използвайки метеорологични и географски данни, както и данни за емисиите. Изходните данни от специализираната версия на модела се използват за провеждане на отделните етапи от анализа на чувствителността на модела.

В публикации [3, 4] са описани резултатите от проведените числени експерименти със специализираната версия SA-DEM с пертурбации на скоростните константи на три от химичните реакции. Експериментите са направени върху два мощни суперкомпютъра – Sunfire E25000 и IBM Blue Gene/P. Първата машина има 72 двудрени процесора Ultrasparc IV (1350 MHz, 2 level cashe) и е част от високопроизводителен клъстер в Техническият университет в Дания. Втората машина IBM Blue Gene/P от Националния център за суперкомпютърни приложения (най-мощната паралелна машина в България по това време), разполага с 8192 изчислителни ядра и с повече от 23 Tflops теоретична максимална производителност. Разработената специализирана версия показва сравнително добра скалируемост и на двете машини, като се забелязва известно предимство при IBM Blue Gene/P. Показани са и резултати от предварителното изследване на чувствителността за пет важни замърсители във въздуха.

В публикации [5, 6, 7] са описани характеристиките (паралелна ефективност и ускорение) на специализираната версия SA-DEM с три йерархични нива на паралелизъм при реализацията върху суперкомпютър IBM Blue Gene/P и в грид среда. На най-високото ниво на паралелизъм се прави разпаралеляване на задачата по различните стойности на вектора от пертурбационни коефициенти, прилагани към анализирания параметри на модела. На средното ниво се прави разпаралеляване на базата на разделяне на изчислителната област. В тези две нива се използва моделът на паралелизъм с разпределена памет (реализиран чрез библиотеката MPI от стандартни комуникационни процедури). Двете нива осигуряват по-висока степен на паралелизъм с разпределена памет. На най-ниското ниво се използва моделът на паралелизъм с обща памет (реализиран с помощта на OpenMP директиви) с цел ефективно използване на изчислителните възможности на суперкомпютъра IBM BlueGene/P.

Различните подпакети на SA-DEM се скалират по различен начин. Подпакетът, опиващ химичните процеси, налага интензивни изчисления, но се скалира много добре при различен брой процесори (20 – 3840 процесора). Подпакетът, описващ адвекцията, се характеризира с по-ниска паралелна ефективност, въпреки че за по-малък брой процесори (20 - 640) скалируемостта е много добра. Общата паралелна ефективност на пакета пада при голям брой процесори (под 50 % при над 960 процесора), поради нарастването на входно-изходните операции, а броят на входно-изходните устройства е недостатъчен в сравнение с броя на процесорите и другите ресурси на машината.

Числените експерименти в грид-среда са проведени на грид сайта BG01-IPP (най-големият грид сайт в България по това време). Той разполага с 36 сървъра, общо 5 TB памет за съхранение на данни и 640 изчислителни ядра (2.8 GHz), които са по-бързи в сравнение с ядрата на суперкомпютъра IBM Blue Gene/P (850 MHz). Въпреки че постигането на ефективно разпаралеляване в грид среда е доста по-трудно в сравнение със суперкомпютър като IBM Blue Gene/P, производителността върху единичен процесор в сайта BG01-IPP е по-висока в сравнение с производителността върху единичен процесор на IBM Blue Gene/P.

С версията SA-DEM са получени голям брой данни, съответстващи на различни стойности на скоростните коефициенти на част от химичните реакции, които са използвани за провеждането на анализа на чувствителността на разглеждания модел.

В публикация [8] са описани резултатите от изследването на чувствителността на концентрациите на озон, симулирани от модела UNI-DEM, спрямо скоростните константи на шест химични реакции. Необходимите данни са получени в резултат на проведени числени експерименти със специализираната версия за анализ на чувствителността на Датския Ойлеров модел SA-DEM с три йерархични нива на паралелизъм върху клъстъра IBM MareNostrum III на Суперкомпютърния център в Барселона, Испания (BSC). IBM MareNostrum III е най-мощният засега испански суперкомпютър, който разполага с 3056

изчислителни възела и 1,1 PetaFLOPS теоретична максимална производителност. Освен по-големия брой и по-бързи процесори в сравнение с българския IBM Blue Gene/P, тази машина има и значително повече оперативна памет (32 GB RAM на възел, при само 2 GB RAM на възел за Blue Gene/P). Тези характеристики на кълъстера направиха възможно да се направят множество успешни експерименти върху различен брой процесори и с версията на SA-DEM с най-фината мрежа за дискретизация на областта (480 x 480). Получените резултати от числените експерименти върху испанския суперкомпютър показват добра ефективност и скалируемост на новата реализация на SA-DEM.

### 2.1.2. Проучване на чувствителността спрямо скоростните константи на химични реакции

В публикации [9, 10, 11, 12] са описани резултатите от численото изследване на чувствителността на концентрацията на важен замърсител като озона спрямо измененията на скоростните константи на протичащите химични реакции, описани в математическия модел UNI-DEM (SA-DEM), с различни подходи за анализ на чувствителността и алгоритми за числено интегриране. От предварителни изследвания е установено, че само три химични реакции (две - зависещи от времето и една – независеща) оказват по-съществено влияние върху концентрациите на озон. Тези данни са използвани за настоящото изследване.

За числените експерименти са използвани два подхода за глобален анализ на чувствителността, спадащи към методите, основани на дисперсията (метод на Соболев и амплитуден тест на Фурие за чувствителността, FAST), алгоритми Монте Карло с различна скорост на сходимост (обикновен алгоритъм Монте Карло, адаптивен алгоритъм, алгоритъм квази-Монте Карло с редици на Соболев и алгоритъм Монте Карло с „изместени“ точки на Соболев), генератор на случайни числа (SFMT) и софтуерен пакет за анализ на чувствителността (SIMLAB). Направен е анализ на ефективността на алгоритмите (по отношение на относителната грешка и изчислителното време) при приближеното пресмятане на числените индикатори на чувствителността.

Резултатите от числените експерименти при проучването на подходящ апроксимационен апарат за приближаване на таблици с данни с цел генериране на моделна функция в аналитичен вид показаха, че средноквадратичната грешка се влияе повече от областта, отколкото от степента на полинома. Мрежовата функция (дефинирана чрез стойности на модела) е апроксимирана с полиноми от четвърта степен с 35 неизвестни коефициенти чрез софтуерния продукт MATLAB.

От анализа на числените резултати за относителната грешка, изчислителното време и стойностите на индексите на чувствителността могат да се направят следните изводи:

- 1) за гладки подинтегрални функции обикновеният алгоритъм Монте Карло и квази-Монте Карло са достатъчно ефективни, но алгоритъмът Монте Карло с „изместени“ точки на Соболев води до по-малка относителна грешка в сравнение с алгоритъма квази-Монте Карло за повечето от избраните размерности на извадката;
- 2) за негладки функции или гладки функции с изчислителни особености (каквато се оказва приближената моделна функция – с локален максимум близо до един от краищата на дефиниционната област) се изисква прилагането на по-ефективни алгоритми като адаптивен алгоритъм Монте Карло или алгоритъм Монте Карло, основаващ се на квазислучайни редици на Соболев;
- 3) адаптивният алгоритъм Монте Карло показва съществено предимство пред реализираните в пакета SIMLAB алгоритми при пресмятането на малки по стойност индекси на чувствителността, като при него има възможност да се контролира размерността на случайната извадка в критични подобласти от дефиниционната област и нивото на удовлетворителна точност при пресмятане;
- 4) в случая на сравнително малки по стойност индекси на чувствителността и негладки функции алгоритъмът Монте Карло, основаващ се на квазислучайни редици на Соболев, е най-надежден в сравнение с другите изследвани алгоритми по отношение на точност и ефективност.
- 5) самостоятелните приноси на параметрите доминират над съвместните им приноси, което

показва адитивност на модела;

- б) концентрациите на озон се влияят съществено само от скоростните константи на две от *избраните* химични реакции, което определя наличието на малки по стойност индекси на чувствителността, съответстващи на третата химична реакция.

В публикация [13] е проведено задълбочено теоретично проучване и е продължено численото изучаване на свойствата на разработения алгоритъм Монте Карло за числено интегриране, използващ „*изместени*“ квазислучайни числа на Соболю. Доказано е, че този алгоритъм има оптимална скорост на сходимост за непрекъснати функции с ограничени частни производни от първи ред. Направено е сравнение по отношение на относителната грешка на полученото приближение и изчислителното време за неговото пресмятане с алгоритъм квази-Монте Карло, както и с разбъркани (scrambled) редици на Соболю. Идеята за този тип модифициране (рандомизация) на точките е предложена от Оуен и е наречена Owen scrambling. Използван е алгоритъм от библиотеката на NAG C Library (<http://www.nag.co.uk/>), реализиращ подхода на Оуен, който дава възможност за избор на три реализации за разбъркване на редиците. В числените експерименти за генерирането на псевдослучайни числа е използван генераторът SFMT.

При изследването на изчислителната ефективност на алгоритмите са проведени числени експерименти за различни класове от подинтегрални функции - използван е тестов пример с гладка подинтегрална функция и тестов пример с негладка подинтегрална функция. Направени са експерименти и с приближаващата функция на данните, генерирани с версията SA-DEM на модела UNI-DEM. В случая на математическия модел изследването цели сравнение на разглежданите алгоритми по отношение на тяхната ефективност при численото пресмятане на индексите на чувствителността, съответстващи на концентрациите на някои замърсители (като озон), спрямо скоростните константи на избрани химични реакции.

Направено е числено изследване на свойствата на трите реализации за разбъркване на редиците – подход на Оуен, подход на Фор и Тезука и комбиниран подход от първите два. Като цяло първият подход показва известно предимство по отношение на относителната грешка на оценяваните величини и затова е избран за по-нататъшното сравнение с разглеждания алгоритъм Монте Карло с „*изместени*“ квазислучайни числа на Соболю. Въпреки това, при по-големи размерности на извадката комбинираният подход води до по-малка относителна грешка в порядъци.

Въз основа на получените резултати от проведеното експериментално проучване са направени изводи и препоръки за спектъра на приложение на изследвания алгоритъм и надеждността на получените оценки. Един от важните изводи е, че всеки от разглежданите алгоритми е сходящ с очакваната скорост на сходимост и води до достатъчно ефективно пресмятане на неизвестните величини (стойности на многомерни интегрални функции с гладки и негладки подинтегрални функции). Въпреки това се забелязва предимство (по-малка относителна грешка за фиксирана размерност на извадката) за алгоритъма Монте Карло с „*изместени*“ квазислучайни точки на Соболю, както и за алгоритмите с разбъркани квазислучайни редици, спрямо оригиналния алгоритъм квази-Монте Карло в случая на негладки подинтегрални функции. От друга страна, в сравнение с алгоритмите с разбъркани квазислучайни редици разглежданият алгоритъм дава подобни резултати за порядъка на относителната грешка. Но има и редица случаи (при различна размерност на случайната извадка), при които този алгоритъм има съществено предимство. Това е демонстрирано при приближеното пресмятане на индекси на чувствителността от по-висок ред за модела UNI-DEM (SA-DEM), които се оказали малки по стойност. Пресмятането на малките индекси на чувствителността с необходимата точност е важно за достоверното пресмятане и на останалите индекси, тъй като сумата на всички индекси (от произволен ред) е единица. Това гарантира по-надеждна интерпретация на окончателните резултати с цел класификация на входните параметри на модела.

В публикация [14] са описани резултатите от проведени числени експерименти за изследване на чувствителността на концентрацията на озон в модела UNI-DEM (SA-DEM) спрямо скоростните константи на шест химични реакции (повече в сравнение с предишните проучвания). Експериментите са проведени за четири европейски града (Генуа, Милано, Манчестър и Единбург) и са осъществени със



софтуерни пакети за научни пресмятания (MATLAB и MATHEMATICA).

Мрежовата функция е апроксимирана с полиноми от втора степен (28 неизвестни коефициенти) чрез софтуерния продукт MATLAB. В резултат на направеното сравнение на грешките от апроксимацията с полиноми от различна степен се установи, че полиномите от втора степен дават грешка с удовлетворителна точност и показват устойчивост на порядъка на грешката при различни стъпки на мрежата. Числените експерименти за пресмятането на индексите на чувствителността са проведени на MATHEMATICA.

Поради ненадеждност на резултатите със стандартния метод на Собол за глобален анализ на чувствителността, е приложен подходът „*корелирана извадка*“ с цел преодоляване на загубата на точност в случая на малки по стойност индекси на чувствителността. Подходът е предложен от Салтели и Кучеренко. Получените резултати за индексите на чувствителността показват:

- 1) адитивност на модела спрямо разглежданите входни параметри;
- 2) потвърждаване на изводите, направени при изследването спрямо скоростните константи на по-малък брой химични реакции;
- 3) сравнение с предишните изследвания е идентифициран още един важен входен параметър по отношение на пертурбациите в концентрациите на озон, както и още два, чието влияние не може да се пренебрегне;
- 4) несъществено влияние на географското разположение върху стойностите на оценяваните величини.

В публикация [15] са конструирани и изследвани ефективни алгоритми Монте Карло за числено интегриране. Единият алгоритъм представлява модификация на разработения по-рано алгоритъм, използващ „*изместени*“ точки на Собол. Идеята на този алгоритъм е, че освен случайна точка върху сфера с радиус съответната квазислучайна точка на Собол се генерира още една – нейната централно-симетрична точка спрямо центъра на съответната подобласт, на която принадлежи оригиналната квазислучайна точка на Собол.

Предложена е и една модификация на новия алгоритъм, която преодолява изчислителните недостатъци на другите два алгоритъма, използващи „*изместени*“ точки на Собол (проверката дали генерираната случайна точка върху сферата остава в същата подобласт, както точката на Собол, за да се запазят свойствата за „равномерна“ разпределеност на новата редица). Този алгоритъм обединява идеята за разделяне на областта на интегриране на равномерно малки подобласти, както и идеята да се генерира случайна точка, която да е централно-симетрична на друга предварително генерирана случайна точка в същата подобласт. Това е известен подход за намаляване на дисперсията на конструираната случайна величина. Доказано е, че двата нови алгоритъма имат оптимален порядък на сходимост за непрекъснати функции с непрекъснати производни от първи ред и ограничени частни производни от втори ред. От получените оценки се вижда, че тези два алгоритъма имат повишен порядък на сходимост в сравнение с първия алгоритъм, използващ „*изместени*“ точки на Собол.

Проведени са числени експерименти с конструираните алгоритми и е направено сравнение с резултатите от съществуващи алгоритми Монте Карло за гладки и негладки подинтегрални функции, както и за индексите на чувствителността за модела UNI-DEM (SA-DEM). Числените пресмятания показват, че

- 1) експериментите потвърждават теоретичните оценки за подобрената скорост на сходимост на новите алгоритми, които дават надеждни резултати при числено интегриране по отношение на относителната грешка и изчислителното време;
- 2) двата нови алгоритъма се характеризират с относителни грешки с еднакъв порядък (което е очаквано), но вторият алгоритъм има предимство в изчислителното време;
- 3) двата нови алгоритъма дават по-малки относителни грешки (за някои случаи дори в порядъци) и като цяло са по-ефективни в сравнение с оригиналния алгоритъм квази-Монте Карло и първия алгоритъм, използващ „*изместени*“ точки на Собол, при интегрирането на гладки функции.

В публикация [16] е описан разработеният начален прототип на визуализационен апарат за представяне на получените резултати от изследване на чувствителността на озоновите концентрации спрямо колебанията на скоростните константи на някои химични реакции в модела за далечен пренос на замърсители във въздуха UNI-DEM (SA-DEM). Визуализационният апарат е разработен с GUI Builder на Matlab. За да се визуализират получените резултати с таблици и графики, от менюто се избират различни генератори за случайни числа, различни алгоритми Монте Карло, както и различни подходи за анализ на чувствителността, които са приложени при числените изследвания. С апарата могат да се видят резултати за индексите от първи ред и пълните индекси на чувствителността, получени с MATLAB, R Package и SIMLAB. Достъпни са и резултати за относителната грешка и изчислителното време, получени с алгоритъм Монте Карло, основан на квазислучайни редици на Собол, както и адаптивен алгоритъм Монте Карло.

### 2.1.3. Проучване на чувствителността спрямо вредните емисии

В публикация [17] са описани резултатите от проведения анализ на чувствителността на концентрациите на основни замърсители във въздуха (озон, амоняк, амониев сулфат и амониев нитрат), симулирани от модел за далечен пренос на замърсители във въздуха UNI-DEM (SA-DEM), спрямо нивата на четири групи от вредни емисии в резултат от човешка дейност – азотен оксид и диоксид, серен диоксид, амоняк, антропогенни въглеводороди, в три европейски градове с различно географско разположение (Милано, Манчестър и Единбург).

Като апроксимационен апарат са тествани полиноми от различни степени. За настоящите пресмятания са избрани полиноми от втора степен за приближаване на данните, получени със SA-DEM, тъй като грешката, съответстващата на тези полиноми, е устойчива при намаляване на стъпката на мрежата и намалява плавно при намаляване на обема на дефиниционната област.

Изследвана е ефективността на специфични техники за намаляване на дисперсията при пресмятането с надеждна точност на малките по стойност индекси на чувствителността с цел преодоляване на загубата на точност. Числените експерименти са проведени със софтуерните продукти MATLAB и MATHEMATICA. Показано е, че подходът, наречен „корелирана извадка“, дава надеждни резултати за целия набор от индекси (индекси от първи, втори, трети и четвърти ред и пълни индекси). Въпреки че някои от индексите от първи ред са малки по стойност, опростявания на модела не могат да се направят на този етап, защото всяка група от емисии влияе съществено върху някое от избраните химични съединения.

Основните изводи за влиянието на разглежданите групи от емисии върху концентрацията на избраните замърсители във въздуха в различните градове са следните:

- 1) най-съществено е влиянието на географското разположение на градовете върху концентрацията на озон; наблюдава се известно влияние и върху концентрацията на амониев сулфат и амониев нитрат и почти никакво влияние върху концентрацията на амоняк;
- 2) най-съществено влияние върху концентрацията на озон в Милано и Единбург имат емисиите от антропогенни въглеводороди, докато в Манчестър доминантна роля имат азотният оксид и диоксид;
- 3) най-съществено влияние върху концентрацията на амониев сулфат и амониев нитрат имат емисиите от серен диоксид; по-слабо, но съществено, е и влиянието на емисиите от амоняк;
- 4) най-съществено влияние върху концентрацията на амоняк очаквано имат емисиите от амоняк.

## 2.2. Математически модели за пренос на електрони

В публикация [18] са описани резултатите от провеждането на анализ на чувствителността на физичен модел за пренос на електрони. В тестовия модел са фиксирани следните параметри: изследване на чувствителността на уравнението на Болцман, описващо пренос на електрони в едномерен силициев

диод, спрямо колебанията на променливите, свързани с геометрията, температурата и концентрацията на допинга<sup>2</sup> на устройството.

За осъществяването на процедурата за анализ на чувствителността са генерирани стойности на променливите със софтуерния пакет за анализ на чувствителността SIMLAB, като са използвани квазислучайни редици на Соболю. Получена е и таблица със стойностите на модела в генерираните точки. Пресмятанятията за числените индикатори са проведени с пакета за анализ на чувствителността SIMLAB и са приложени два от най-ефективните и надеждни подходи, реализирани в него: FAST и метод на Соболю. Тези методи дават възможност за пресмятане както на индексите на чувствителността от съответен ред, така и на пълния индекс за всеки от параметрите. Затова с първия подход са пресметнати индексите на чувствителността от първи ред и пълните индекси, а с втория – и всички индекси от по-висок ред (до 7-ми включително). Възможността за пресмятане на индексите от по-висок ред с метода на Соболю е съществена, поради това че моделът се оказва неадекватен (особено за по-малки стойности на приложеното напрежение) и приносят на някои от съвместните въздействия на входните параметри е особено важен. Тъй като и двата приложени подхода за анализ на чувствителността се реализират числено със стохастичен метод Монте Карло, изборът на размерността е съществен за устойчивостта на резултатите и надеждната им интерпретация от физична гледна точка.

Експериментите са проведени за 11 различни стойности на приложеното напрежение. Пресметнатите индекси на чувствителността дават възможност за класификация на входните параметри по отношение на тяхната важност върху колебанията на изходния резултат (волт-амперна характеристика), която е различна в зависимост от приложеното напрежение. Например, най-важният параметър при приложено напрежение 0.01V е температурата (пълният индекс на чувствителността е по-голям от 0.6), а при напрежение 0.025V-0.05V – това е концентрацията на допинга на „сорса“ (пълният индекс на чувствителността е по-голям от 0.5). Получените резултати от проведените числени експерименти дават възможност за интерпретация от физична гледна точка, което е трудно постижимо в противен случай, както и полезна информация за съществените параметри на устройството, която е приложима при действителното му проектиране. Теоретичните очаквания за несъществено влияние на два от параметрите (дължината и концентрацията на допинга на „дрейна“) се потвърдиха напълно от проведените числени експерименти и получените резултати с малки по стойност пълни индекси на чувствителността, съответстващи на тези параметри. За по-високи стойности на приложеното напрежение се наблюдава пълна съвместимост на резултатите, получените с двата различни подхода, което демонстрира устойчивост на процеса в този случай.

Уравнението на Вигнер и балистичното уравнение на Болцман за електрон в електрично поле са теоретично еквивалентни за електрически потенциали, които са линейна или квадратична функция на позицията. Това осигурява добра възможност за оценка на стохастичните алгоритми за решаването на уравнението на Вигнер, тъй като решенията на балистичното уравнение на Болцман са аналитично добре известни: Те се представят от траектории на Нютон, съответстващи на ускорение в резултат на постоянно електрическо поле, определено от първата производна на потенциала. Прякото прилагане на тази идея е затруднено от факта, че аналитичната трансформация на първото уравнение във второто включва обобщени функции. По-специално, потенциалът на Вигнер действа като производна на делта-функцията, което води до получаване на ускоряващата сила на Нютон. Вторият проблем е свързан с дискретния характер на импулсното пространство, в което се формулира уравнението на Вигнер.

В публикация [19] е представен ансамблов алгоритъм за квантов транспорт, чиято основна характеристика е използването на квантово фазово пространство и дискретни закони за разсейване. Разработеният стохастичен подход се характеризира с генериране на числени частици с положителен и отрицателен знак, определян от потенциала на Вигнер. Тези частици остават неподвижни върху възлите от дискретното импулсно пространство и могат да бъдат унищожени (анихилирани) само от частици с обратен знак, генерирани в същия възел. За пръв път се показва, че начинът, по който потенциалът на

---

2 „Допингът“ е процес, в резултат на който силицият (основният полупроводников материал) придобива полупроводникови свойства. При допинга се въвеждат малки количества нечист материал, който от своя страна създава свободни електрони или дупки, през които преминават електроните.

Вигнер генерира частици, позволява преместването на едно начално условие между съседните възли в импулсното пространство. Това дава ускорение на началното разпределение на електроните, като Вторият закон на Нютон се изпълнява в дискретен вид: промяната на импулса на пакета електрони (определен от разстоянието между два възела), разделен за времето на преместване, е равен на електричното поле, разделено на електронната маса. Алгоритъмът използва аниhilация на неразличими частици на последователни стъпки по времето. Дискретната природа на фазовото пространство на Вигнер се синхронизира добре с използваната схема за аниhilация на частици, което помага за намаляване на броя на генерираните заредени частици. Показано е числено, че е възможно по устойчив начин (запазва се изчислителната сложност) да се използват няколко малки стъпки по времето вместо една голяма стъпка, поради аниhilацията на частици след всяка стъпка. Разработеният алгоритъм за квантов транспорт е приложен и тестван за начална конфигурация от електрони, разположени в центъра на фазовото пространство.

Наблюдавани са и са анализирани и някои нефизични ефекти, като е показано, че те изчезват в границата на непрекъснатост, при която разстоянието между възлите клони към нула. Този резултат е първият голям успех в утвърждаването на стохастичния метод, показващ, че генерирането на неподвижни частици със знак, които аниhilират, е пълноправна алтернатива на Закона за ускорението.

## II. Решаване на интегрални уравнения

В публикация [20] е описан алгоритъм Монте Карло за приближено пресмятане на линеен функционал от решението на интегрално уравнение на Фредхолм от втори род, базиран на балансиране на систематичната и стохастичната грешка. Разгледан е проблема за намиране на оптимално съотношение между броя на реализациите на случайната величина и средния брой стъпки в една случайна траектория във веригата на Марков с цел постигане на предварително зададена точност на приближеното решение. Получени са долни граници за броя на реализациите и броя на итерациите във веригата на Марков. Разработеният алгоритъм Монте Карло е приложен върху няколко примера, които имат приложен характер. Числените експерименти са проведени за различни преходни плътности във веригата на Марков – константи или пропорционални на ядрото на интегралното уравнение. Вторият избор на плътност съответства на известен метод Монте Карло, наречен „*почти оптимален*“ в статия на проф. Димов от 1991 г., в която той е изследвал оптималността на алгоритмите Монте Карло в смисъла на Кан и е показал, че при някои специални предположения за ядрото и дясната страна методът е стохастично интерполационен, т.е. е с нулева дисперсия. Получената експериментална относителна грешка потвърждава теоретичната оценка, дори в много от случаите значително я подобрява. „*Почти оптималният*“ алгоритъм дава очаквано по-надеждни резултати по отношение на получената относителна грешка.