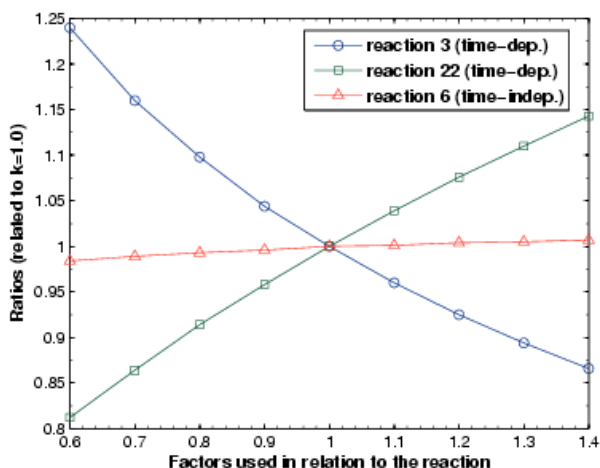
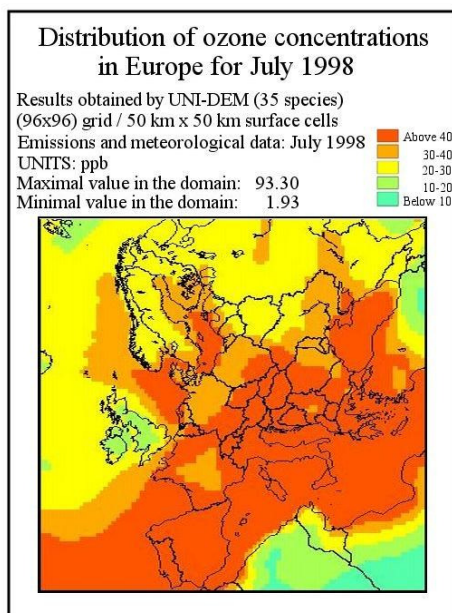


РП4: Монте Карло методи за анализ на чувствителността на големи математически модели

1. Основни дейности и резултати

Задача 4.1: Генериране на мрежови функции за различни климатични сценарии (химични замърсители, химични реакции), използвайки 2- и 3-D Унифициран датски Ойлеров модел (UNI-DEM). В съответствие със задача 4.1. е разработена и реализирана специална версия на UNI-DEM за получаване на мрежови функции за анализ на чувствителността (SA-DEM) на модела по отношение на определени параметри от химическия подмодел, управляващи скоростта на избрани химични реакции. Разпределението на озоновите концентрации за месец юли 1998 година е показано на Фигура 1. Резултатите, представени на графики от този тип, позволяват да се идентифицират точките, в които концентрацията на съответния замърсител достига своя максимум. Извършени са множество паралелни експерименти за получаване на необходимите резултати, приложени след това за пресмятане на тоталните индекси на чувствителност по метода на Собол. Целта на последвалите експерименти е изследване на изменението на грешката на апроксимация и стойностите на пълните индекси на чувствителността с увеличаването на размерността на таблицата с данни (стойности на концентрациите).

Предоставените данни са получени с Датския Ойлеров модел в $[0.6; 1.4]^3$ при едновременно вариране на пертурбационните параметри за скоростните константи на три избрани химични реакции от химичната схема CBM IV (Цв. Остромски, Ив. Димов, Р. Георгиева). Част от резултатите са публикувани в статии [DG_09a, ODGZ_09a, DG_09]. Разработена е предварителната, а в последствие и основната MPI-реализация на унифицираната версия на Датския Ойлеров модел за далечен пренос на замърсители във въздуха (UNI-DEM) върху суперкомпютър IBM BlueGene/P (Кр. Георгиев, Цв. Остромски). Резултатите са публикувани в [ODGZ_09a, GZ_09a, GZ_09a2]. Извършена е настройка на параметрите на UNI-DEM с отчитане на някои от характеристиките на IBM BlueGene/P и в съответствие с извършваните промени в машинния софтуер.



Фиг. 1: Разпределение на озоновите концентрации над Европа за месец юли 1998. **Фиг. 2:** Чувствителност на озоновите концентрации към измененията на някои скоростни константи.

Извършени са голям брой компютърни експерименти за тестване на модела, касаещи реално протичащи процеси в атмосферата. Резултатите бяха сравнени с такива, получени върху други паралелни компютри

(Кр. Георгиев), и са описани в [GZ_09s]. Извършени са голям брой компютърни експерименти с реални метеорологични и емисионни данни за територията на Европа и е изследвано замърсяването на въздуха за избрани типични епизоди в периода 1989 – 1998 г. За същия период са направени компютърни експерименти с цел изследване на влиянието на някои от климатичните сценарии върху нивата на замърсяване на въздуха в Европа, и в частност в Югоизточна Европа. Извършени са изследвания, касаещи използването на специализирана техника за разреждени матрици върху паралелни компютри (Кр. Георгиев). Резултатите са описани в [GZ1_09p, GZ2_09p].

Задача 4.2: *Изследване на различни техники за апроксимиране на мрежови функции, оценка на грешката.* Изследвани са различни техники за апроксимация. Спрели сме се на минимизиране на дискретната интегрална норма като напълно удовлетворителна на този етап (функциите са сравнително гладки, макар че могат да имат области с „изчислителни особености”, които са изследвани специално). Като апарат сме използвали многомерни полиноми от 3-та и 4-та степени и сплайн-функции. Числено е изследвана грешката от апроксимация за различни многомерни хиперкубове (Ив. Димов, Р. Георгиева). Получените резултати са публикувани в [DG_09a].

Задача 4.3: *Анализ на чувствителността на изходните параметри на UNI-DEM към нивата на емисиите с цел подпомагане на вземащите решения при изработване на екологичните директиви; визуализация на резултатите.* Разработен е адаптивен алгоритъм Монте Карло за пресмятане на индексите на чувствителността (от първи ред и пълните индекси) по метода на Соболев и негови модификации. С помощта на числени експерименти е изследвано как скоростните константи на някои химични реакции влияят върху концентрациите на замърсителите. Един пример е показан на Фигура 2. Проведени са числени експерименти с два подхода за пресмятане на малки индекси на чувствителността (с цел преодоляване на загуба на точност при пресмятане на малки по стойност индекси на чувствителността). Използван е обикновен и адаптивен алгоритъм Монте Карло за пресмятане на интеграли с моделна функция, описваща разпределението на концентрацията на замърсителите в зависимост от стойностите на скоростните константи. За генерирането на случайните числа е използван т.нар. „SIMD-oriented Fast Mersenne Twister generator (SFMT)” (Ив. Димов, Р. Георгиева). Получените резултати са публикувани в [DG_09a]. Разработена е систематизирана процедура за анализ на чувствителността, приложена върху модела UNI-DEM. Направили сме сравнение на резултатите, получени при прилагането на предложената схема за анализ на чувствителността, и резултатите, получени при прилагането на един от най-добрите съществуващи софтуерни пакети за анализ на чувствителността - R пакет за статистически пресмятания (<http://www.r-project.org/>). При някои ситуации (при относително малки стойности на индексите на чувствителност) нашата схема има съществени предимства пред съществуващия подход. Основната причина за предпочитане на схемата, предложена в настоящия проект е, че в нея може да се контролира точността на всеки етап от пресмятанията (Р. Георгиева, Ив. Димов, С. Ивановска). Получените резултати са публикувани в [DG_09, DG_09a, DGIOZ_09s, ODGZ_10p].

Част от резултатите са описани в секция „Анализ на чувствителността за модел на далечен пренос на замърсители във въздуха” на дисертацията на Райна Георгиева със заглавие „Изчислителна сложност на алгоритми Монте Карло за многомерни интеграли и интегрални уравнения” за присъждане на образователна и научна степен „Доктор” (научен ръководител: ст.н.с. I ст. дн Иван Димов).

2. Публикации по темата на проекта, където е цитиран проект ДО 02-115/08

а) излезли от печат

[DG_09] I. Dimov, R. Georgieva, Monte Carlo Algorithms for Evaluating Sobol' Sensitivity Indices, Math. Comput. Simul. (2009), doi:10.1016/j.matcom.2009.09.005.

б) приети за печат

[GZ_09a] K. Georgiev, Z. Zlatev, Runs of UNI-DEM Model on IBM BlueGene/P Computer and Analysis of

the Model Performance: - In Proceedings of LSSC 2009, LNCS 5910.

[GZ_09a2] K. Georgiev, Z. Zlatev, Comparison results of running of the Danish Eulerian Model for long-range transport of air pollutants on different kind of high-performance computer architectures, Theoretical and Applied Mechanics.

[DG_09a] I. Dimov, R. Georgieva, Monte Carlo Adaptive Technique for Sensitivity Analysis of a Large-Scale Air Pollution Model. - In Proceedings of LSSC 2009, LNCS 5910.

[ODGZ_09a] Tz. Ostromsky, I. Dimov, R. Georgieva, Z. Zlatev, Sensitivity Analysis of a Large-scale Air Pollution Model: Numerical Aspects and a Highly Parallel Implementation. - In Proceedings of LSSC 2009, LNCS 5910.

в) изпратени за публикуване

[GZ_09s] K. Georgiev, Z. Zlatev, Notes on the Numerical Treatment of Sparse Matrices Arising in a Chemical Model, in: Proc. of BGSIAM meeting, December 21 – 22, 2009.

[DGIOZ_09s] I. Dimov, R. Georgieva, S. Ivanovska, Tz. Ostromsky, Z. Zlatev, Studying the Sensitivity of the Pollutants Concentrations Caused by Variations of Chemical Rates, Journal of Computational and Applied Mathematics.

з) в процес на подготовка

[GZ1_09p] K. Georgiev, Z. Zlatev, Implementation of sparse matrix algorithms in an advection-difusion-chemistry module.

[GZ2_09p] K. Georgiev, Z. Zlatev, Impact of Climate Changes on High Ozone Pollution Levels over the Territory of South-Eastern Europe.

[ODGZ_10p] Tz. Ostromsky, I. Dimov, R. Georgieva, Z. Zlatev, Sensitivity Analysis version of an Air Pollution Model: Parallel Implementation and Numerical Results, Journal of Management of Environmental Quality.

3. Презентации и доклади

[1] K. Georgiev, Comparison Results of Running of the Danish Eulerian Model (UniDEM) on Different Kind of Vector and Parallel Computers (изнесен доклад на Workshop on Numerical Methods and High Performance Computations – interplay and novel ideas, February 17 – 18, 2009, Sofia).

[2] I. Dimov, R. Georgieva, Monte Carlo Adaptive Technique for Sensitivity Analysis of a Large-Scale Air Pollution Model (изнесен доклад на международната конференция “Large Scale Scientific Computations”, LSSC'09, проведена в Созопол).

[3] K. Georgiev, Z. Zlatev, Runs of UniDEM Model on IBM BlueGene/P Computer and Analysis of the Model Performance (изнесен доклад на международната конференция “Large Scale Scientific Computations”, LSSC'09, проведена в Созопол).

[4] Tz. Ostromsky, I. Dimov, R. Georgieva, Z. Zlatev, Sensitivity Analysis of a Large-scale Air Pollution Model: Numerical Aspects and a Highly Parallel Implementation (изнесен доклад на международната конференция “Large Scale Scientific Computations”, LSSC'09, проведена в Созопол).

[5] K. Georgiev, Z. Zlatev, Comparison Results of Running of the Danish Eulerian Model for Long Range Transport of Air Pollutants on Different Kind of High-Performance Computer Architectures (изнесен доклад на 22nd workshop on tropospheric chemical transport modelling, Brescia, Italy, 26-27 November 2009)

4. Други

[1] Среци и дискусии с: а) колегите по пакета от Centre for Advanced Computing and Emerging Technologies (ACET), University of Reading, Рединг, Великобритания - Prof. Dr. Vassil Alexandrov, Dr. Christian Weihrauch и Dr. Simon Branford. б) Prof. Istvan Farago, Dr. Agnes Havasi, Dr. Tamas Szabo от

Eotvos Lorand University, Унгария по методите за разцепване, използвани в UNI-DEM. в) сътрудници на National Environmental Research Institute (Roskilde, Denmark) – Jshrgen Brandt, Lise Marie Frohn, Matthias Ketzel, Lars Moseholm, Michael Evan Goodsite, и др. в) по време на международната конференция “Large Scale Scientific Computations” (LSSC'09) проведена в Созопол – A. Ebel, A. Strunk, O. Iliev (Germany), G. Dimitriu (Romania), R. San Jose (Spain), F. Deutch (Belgium), P. D'Ambra, G. Candiani (Italy), P. Minev (Canada), I. Farago, I. Piechka, A. Havasi, M. Mincsovics, T. Kurics (Hungary), A. Mishev (FYROM), и др.

[2] Провеждане на сбирки за обсъждане на извършената и предстояща работа по задачите на пакета.

[3] Подготовка и представяне на лични отчети от всеки участник в работата по задачите на пакета и обобщени периодични отчети за целия пакет.

[4] Работни срещи в ИПОИ-БАН с цел обсъждане на необходимия лицензиран софтуер за целите и задачите по проекта, който да се инсталира.