

Министерство на образованието, младежта и науката
Фонд “Научни изследвания”, Тематичен конкурс - 2009 г.

ОТЧЕТ

по договор ДТК 02/44/2009

на тема

**Ефективни Монте Карло методи за
големи научно-изследователски задачи**

за периода декември 2009 г. - септември 2011 г. (първи етап)

Ръководител на договора: проф. дн Иван Димов

Базова научна организация: ИИКТ-БАН

Октомври, 2011

Съдържание

1 Научен отчет	1
1.1 Описание на резултатите по изпълнението на работната програма за отчитания период	1
1.2 Разпространение на резултатите	9
1.3 Организиране на конференции и семинари	11
1.4 Списък на научните публикации	12
1.4.1 Излезли от печат	12
1.4.2 Приети за печат	13
1.5 Копия на научните публикации, излезли от печат	15
1.6 Копия на научните публикации, приети за печат	16
2 Финансов отчет	17
3 Справка за дълготрайни материални активи	18
4 Списък на научния колектив	19

1 Научен отчет

1.1 Описание на резултатите по изпълнението на работната програма за отчетния период

Съгласно работната програма за първия етап на проекта са проведени научни изследвания по следните задачи.

Задача 1: Разработване и анализ на нови ефективни Монте Карло (МК) методи за числено интегриране и решаване на интегрални уравнения

Анализ на чувствителността на големи модели на околната среда

Пресмятането на глобалните индекси на чувствителността на Соболев се свежда до числено интегриране. Разработен е ефективен метод Монте Карло за многомерно интегриране [2]. Предложеният алгоритъм обединява свойствата на два от най-добрите съществуващи подходи - квази-Монте Карло интегриране с редици на Соболев и генериране на псевдослучайни числа с генератор SIMD-oriented Fast Mersenne Twister (SFMT) (SFMT). Разработеният алгоритъм използва редици от направляващи числа и алгоритъм за генериране на квазислучайни редици на Соболев, предложени от Joe and Kuо. Всяка нова “случайна” точка се избира като реализация на случайна величина с равномерно разпределение върху сфера с център съответната многомерна квазислучайна точка от генерираната вече редица на Соболев. За оценяването на неизвестната стойност на интеграла се дефинира случайна величина като стойността на подинтегралната функция в тази случайна точка. Изчислителната сложност на предложения алгоритъм не нараства съществено спрямо изчислителната сложност на оригиналния алгоритъм за генериране на квазислучайни числа, когато броят на случайните точки не е твърде голям. При големи стойности изчислителната сложност нараства заради алгоритъма за намиране на минималното разстояние между квазислучайните точки от редицата на Соболев. Получените резултати са докладвани на

- 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A 2010, 19 - 24 август 2010 г. в Боровец.

Проведени са числени експерименти с разработения алгоритъм Монте Карло за пресмятане на индекси на чувствителността за модел на далечен пренос на замърсители във въздуха (Unified Danish Eulerian Model, UNI-DEM). Направено е обобщение на получените резултати за този модел ([3, 20], Reliab. Eng. Syst. Safety, Impact Factor (IF) = 1.897, 2011 г.), като са изследвани: 1. различни подходи, основани на дисперсията, за анализ на чувствителността; 2. алгоритми Монте Карло (адаптивен алгоритъм и алгоритъм, използващ квазислучайни редици на Соболев) и квази-Монте Карло; 3. генератори за случайни числа (Mersenne Twister generator, SFMT generator) и 4. софтуерни пакети (SIMLAB). От анализа на числените резултати могат да се направят следните изводи:

- за гладки подинтегрални функции обикновеният алгоритъм Монте Карло и квази-Монте Карло са достатъчно ефективни;

- за негладки функции с изчислителни особености се изисква прилагането на по-ефективни алгоритми като адаптивен алгоритъм Монте Карло или алгоритъм Монте Карло, използващ квазислучайни редици на Соболев;
- в случая на сравнително малки по стойност индекси на чувствителността и негладки функции алгоритъмът Монте Карло, използващ квазислучайни редици на Соболев, е най-надежден в сравнение с другите изследвани алгоритми по отношение на точност и ефективност.

Получените резултати са представени в докладите

- “Adaptive Monte Carlo Approach for Sensitivity Analysis” (автори I. Dimov, R. Georgieva) и
- “Adaptive Monte Carlo Algorithm for Sensitivity Studies of Eulerian Large-scale Air Pollution Models” (автори I. Dimov, R. Georgieva, Tz. Ostromsky)

на следните конференции

- Sixth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, 19 - 22 юли 2010 г. в Милано, Италия, и
- Fifth Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, 20 - 21 декември 2010 г. в София.

Ефективни МК подходи за моделиране на полупроводникови прибори

Изследвано е поведението на токови носители в наноелектронни прибори. Моделът на транспорт е от смесен тип като включва както квантови процеси, така и класическо разсейване от решетката. Ефекта от последното се отчита като приближение на кохерентната част, което се описва от уравнение от Болцманов тип. Разработен е Монте Карло метод с използване на тегла, който решава това уравнение. Резултатите са представени в доклада

- “Stochastic Algorithm for Solving the Wigner-Boltzmann Correction Equation” (автори M. Nedjalkov, S. Selberherr, I.T. Dimov)

на конференцията

- 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A 2010, 19 - 24 август 2010 г. в Боровец.

Еволюцията на широко използваното в алгоритмите за квантови пресмятания електронно състояние, суперпозиция от два вълнови пакета под влияние на разсейване от решетката, е изследвана с помощта на числени симулации. Разработени са 3 алгоритъма с тегла, които имат различни свойства и са оптимални при определени условия на задачата. Показано е, че в типичен полупроводник, като *GaAs*, квантовата информация оцелява за време под 1 пикосекунда. Така декохеренцията, дължаща се на вибрации на решетката, се оказва основна пречка за разработване на квантови компютри, работещи при стандартни условия. Резултатите са описани в [29, 30] и са докладвани на

- 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations (LSSC), 6-10 юни 2011 год. в Созопол и
- Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, 29 август - 2 септември 2011 год. в Боровец.

Ефективни изчислителни схеми за синтез на реалистични изображения

Изследвани са и експериментално са показани сравнителни резултати за подбор на точкови извадки при Монте Карло решаване на уравнението на рендъринг със стратегията “равномерно разделяне на областта на интегриране” за сфера и полусфера [14]. Показани са предимствата на стратегията за редуциране на дисперсията в сравнение с традиционни техники за подбор на точковите извадки при Монте Карло рендъринг на изображения. Получените резултати са докладвани на

- 8th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, 19 - 25 септември 2010 год. в Родос, Гърция.

Разработени са нови алгоритми за Монте Карло решаване на уравнението на рендъринг от суперконвергентен тип чрез прилагане на стратегията “равномерно разделяне на областта на интегриране” и

- апроксимация чрез сферични триъгълници на областта на интегриране [15] при решаване на огледалния компонент;
- апроксимация в ядрото на огледалния компонент [16] чрез използване на информацията от генерираните точкови извадки за намиране на решението на дифузионния компонент на рендъринг уравнението.

Получените резултати са докладвани на

- 8th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, 19 - 25 септември 2010 год. в Родос, Гърция, и
- International Conference Automatics and Informatics, 3 - 7 октомври 2010 год. в София.

Разработени са и са експериментирани нови техники и алгоритми за моделиране, симулация и реконструкция на медицински изображения в компютърната томография (PET - Positron Emission Tomography) чрез прецизно третиране на транспорта на гама-фотоните [13] и компенсирание на допълнителните грешки, внасяни от детектора. Получените резултати са докладвани на

- 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A 2010, 19 - 24 август 2010 г. в Боровец.

Монте Карло анализ на чувствителността за оптимизационни задачи

Голяма част от оптимизационните задачи, идващи от реалния живот и индустрията, изискват огромно количество изчислителни ресурси като памет и време. Не е практично към тях да се прилагат точни или класически числени методи. За това тези задачи се решават с Монте Карло методи. Методът на мравките е Монте Карло метод за решаване на комбинаторни оптимизационни задачи.

Подобрено е функционирането на метода на мравките, а оттам и на качеството на постигнатите резултати. Изследването е фокусирано основно върху избора на стартов връх на мравките при построяването на решения. Създадени са няколко вида оценяващи функции, след което са конструирани разнообразни стартови стратегии. Стратегиите могат да се ползват самостоятелно или да

се комбинират. Направено е сравнение между стратегиите, когато се използва една и съща оценяваща функция, както и поведението на алгоритъма при различни оценяващи функции. Получените резултати са описани и/или публикувани в [1, 5, 6, 7, 11, 12, 18, 19]. Резултатите са докладвани на

- Forth Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, 21-22 декември 2009 г. в София,
- 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A 2010, 19-24 август 2010 г. в Боровец,
- International Conference on Information Systems and Grid Technologies, 28 - 29 май 2010 г. в София,
- International Multiconference on Computer Science and Information Technology, 18-20 октомври 2010 г. във Висла, Полша,
- 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations (LSSC), 6-10 юни 2011 год. в Созопол,
- Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, 29 август - 2 септември 2011 год. в Боровец.

Задача 2: Разработване на математически модели, подходящи за паралелни реализации

Анализ на чувствителността на големи модели на околната среда

Разработена е специализирана версия SA-DEM (на базата на унифицираната UNIDEM версия) за автоматизирано провеждане на експерименти и получаване на данни за анализ на чувствителността на двумерния датски Ойлеров модел върху мрежа със стъпка 50 км (96 x 96 x 1). Получени са числени резултати - мрежови функции, използвани за анализа на чувствителността на датския Ойлеров модел по отношение на три от коефициентите, определящи скоростта на химическите реакции с най-голямо значение за изходните резултати за концентрациите на озона в атмосферата.

В [17] е направен анализ на точността на нова диференчна схема за едномерното уравнение на адвекцията, основаваща се на метода на Кранк-Никълсън с подобрена сходимост посредством екстраполационния метод на Ричардсън. Изследвана е възможността за ефективното ѝ приложение в адвекционния подмодел на датския Ойлеров модел и паралелната му реализация. Получените резултати са докладвани на

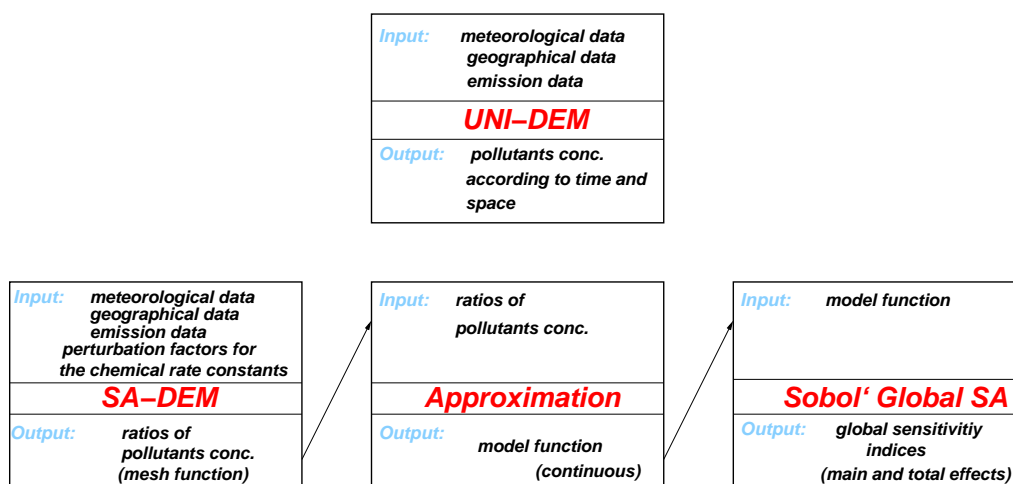
- 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A 2010, 19 - 24 август 2010 г. в Боровец.

Задача 3: Разработване на подход с подобрена сходимост за анализ на чувствителността; пресмятане на пълния индекс на чувствителност

Анализ на чувствителността на големи модели на околната среда

На Фигура 1 е дадена обобщена схема, представяща различните етапи на описаната процедура за разглеждания модел (датски Ойлеров модел). За да бъде възможно прилагането на апарата за анализ на чувствителността към даден математически модел, е необходимо този модел да бъде адаптиран за тази процедура. Това предполага разработване на “адаптирана” версия на модела (в случая SA-DEM) с модифицирани множества от входни и изходни параметри, съобразени със специфичните изисквания на техниките за анализ на чувствителността. След генерирането на данните с модела (изходни параметри) в общия случай се налага апроксимация на получените мрежови функции. В резултат на това се произвежда непрекъснатата моделна функция, която играе ролята на входен параметър на избрания подход за анализ на чувствителността. Като окончателен изходен параметър в схемата се получават пресметнатите (точно или приближено) числени индикатори на чувствителността, които представят количествено влиянието на колебанията във входните параметри върху колебанията на изходния резултат на разглеждания математическия модел.

В [4] (J COMPUT APPL MATH, IF = 1.292, 2010 г.) е систематизирана и подробно описана схемата на провеждане на анализ на чувствителността на концентрацията на замърсители във въздуха спрямо скоростните константи на протичащите химични реакции при преноса на замърсители във въздуха в Европа с т.нар. Унифициран датски Ойлеров модел (Unified Danish Eulerian Model, UNI-DEM). Това е един от математическите модели, който описва адекватно съответните физични и химични процеси при далечен пренос на замърсители във въздуха. Тъй като химичните реакции играят изключително важна роля в математическия модел, проведенният анализ е именно спрямо скоростните константи на избрани химични реакции. Като начална стъпка за апроксимацията на данните са използвани полиноми от четвърта степен за приближаване на мрежовата функция, чиито стойности са генерирани от модела UNI-DEM. Направените числени експеримен-



Фигура 1: Схема за анализ на чувствителността на модела UNI-DEM.

ти показват, че Евклидовата векторна норма на резидуала се влияе повече от дефиниционната област на входните параметри, отколкото от степента на полинома. Тази особеност е една от предпоставките за определянето на областта на изменение на пертурбационните параметри. В [26] (IJER, IF = 0.626) са включени основните резултати от анализа на чувствителността на датския Ойлеров модел по отношение на три от коефициентите, определящи скоростта на химическите реакции с най-голямо значение за изходните резултати за концентрациите на озона в атмосферата. Те са получени с помощта на разработената от нас специализирана версия на модела (SA-DEM). Включени са таблици с времена и ускорения, демонстриращи ефективността на паралелната реализация на SA-DEM.

На базата на резултати от предварителните и настоящите изследвания, се стига до заключението, че концентрациите на озона се повлияват в най-висока степен от колебанията на скоростните константи на следните три химични реакции от схемата CBM-IV (the condensed Carbon Bond Mechanism):

- $O_3 + NO \implies NO_2$
- $HO_2 + NO \implies OH + NO_2$
- $OH + CO \implies HO_2$

Трябва да се отбележи, че озонът не участва във всяка от тези реакции, а участват други важни химични съединения, които водят до произвеждането на озон във въздуха. Обзор на резултатите е представен в доклада

- “Monte Carlo Algorithms for Variance-Based Sensitivity Studies” (автори I. Dimov, R. Georgieva, Tz. Ostromsky, Z. Zlatev)

на конференцията

- 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, 6 - 10 юни 2011 г. в Созопол.

Ефективни МК подходи за моделиране на полупроводникови прибори

Т. нар. компактни модели се използват за симулации на интегрални схеми. Тези модели се представят чрез уравнения, базирани на фундаментални решения (на диференциални уравнения, описващи основните физични процеси в интегрални схеми) с повече от 100 неизвестни параметъра. Целта е да се симулират интегрални схеми с неидентични устройства (транзистори), което е еквивалентно на избор на различни стойности на съответните параметри за всеки транзистор в интегралната схема. За да бъде избрана конкретна стойност за даден параметър е необходимо предварително да се знае неговото разпределение. Разпределението се определя чрез ”напасване” със статистическото множество от електрически характеристики, получени при физическата симулация на прибора. В общия случай, броят на различните транзистори е повече от 10^6 . От друга страна, колкото по-малки стават транзисторите по размери, толкова повече несъвършенствата им на атомно ниво (т. нар. статистически колебания) влияят върху тяхното функциониране. Затова основателни са следните два въпроса: Кое е “най-подходящото” (и минимално) множество от параметри, които да бъдат избрани, така че в максимална степен да се прогнозира функционирането на съответния транзистор/интегрална схема/чип? и Как да класифицираме елементите в това множество?

Обект на настоящето изследване е моделът BSIM4, базиран на праговото напрежение (threshold-voltage-based BSIM4, <http://www-device.eecs.berkeley.edu/~bsim3/bsim4.html>). Направени са начални проучвания относно степента на влияние на статистическите колебания на четири параметъра с апарата на анализа на чувствителността: V_{th0} (basic long-channel threshold voltage parameter), U_0 (low-field mobility parameter), R_{dsw} (basic source/drain resistance parameter), D_{sub} - drain-induced barrier-lowering (DIBL) parameter. На този етап числените експерименти с цел приближено пресмятане на съответните индекси на чувствителността са проведени със софтуерния продукт за анализ на чувствителността SIMLAB v2.2 (<http://simlab.jrc.ec.europa.eu/>). Резултатите позволяват класификация по важност на параметрите, като най-важни са първите два параметъра (отчетено е не само самостоятелния им принос, но и съвместния принос с другите параметри). Тъй като се получават недопустими отрицателни стойности, е изследвано множеството само от три параметри, след като е изключен параметъра със сравнително пренебрежим по стойност пълен индекс. Подредбата по важност на параметрите се запазва. Предстои изследване, свързано със следните отворени въпроси: С какво разпределение да се генерират параметрите - равномерно (както досега) или нормално? Как се модифицира избраната техника за анализ на чувствителността в случая на неортогонални входни параметри? Получените начални резултати са представени в доклада

- "Sensitivity Analysis of Compact Models in Nanodevice Modeling" (автори А. Asenov, В. Cheng, I. Dimov, R. Georgieva, У. Kovac, С. Millar)

на конференцията

- 8th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, IMACS MCM 2011, 29 август - 02 септември 2011 г. в Боровец.

Монте Карло анализ на чувствителността за оптимизационни задачи

Изследвана е чувствителността на метода на мравките спрямо някои от управляващите параметри. Като тест е използвана задачата за раницата, защото е представител на задачите за подмножества и се предполага, че изборът на начален връх влияе най-много на този тип задачи. Чрез задачата за раницата се описват много задачи, идващи от реалния живот и индустрията, като разпределение на бюджет, поддръждане на товари, пакетиране, разкрояване, управление, разпределение. Задачата за раницата се явява и като подзадача в някои по-сложни оптимизационни задачи, затова е добре да бъде създаден алгоритъм, намиращ близки до оптималното решение и използващ малко компютърни ресурси. Направена е програмна реализация на всяка една от модификациите на метода на мравките. Получените резултати са описани и/или публикувани в [8, 10, 21, 22]. Резултатите са докладвани на

- 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, NM&A 2010, 19 - 24 август 2010 г. в Боровец,
- Fifth Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, 20 - 21 декември 2010 г. в София,
- 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations (LSSC), 6 - 10 юни 2011 год. в Созопол,

- International Conference on Intuitionistic Fuzzy Sets, 11 - 12 май 2011 г. в Бургас.

Задача 4: Реализация на разработените нови алгоритми върху суперкомпютър IBM BlueGene/P и в грид-среда

Анализ на чувствителността на големи модели на околната среда

В [27] и [28] са направени подобрения в производителността на специализираната версия на UNI-DEM за анализ на чувствителността на датския Ойлеров модел (SA-DEM), както и редица числени експерименти за оценка на нейната скалируемост и ефективност. Представена е нова йерархична паралелизация на три нива, реализирана на суперкомпютъра IBM BlueGene/P, позволяваща ефективно използване на целия капацитет на суперкомпютъра. В [28] е представена и Грид реализацията на SA-DEM. Получените резултати са докладвани на

- 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, 6-10 юни 2011 год. в Созопол
- Third International Conference of the Euro-American Consortium for Promoting the Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, 20 - 25 юни 2011 год. в Албена.

Обзор на получените резултати по задачата за анализ на чувствителността на датския Ойлеров модел с подхода на Соболь и ефективната му реализация в паралелна и Грид среда е направен в доклада

- "Sensitivity Analysis Study of a Large-scale Air Pollution Model - Computational Problems and High Performance Solutions" (автори Tz. Ostromsky, I. Dimov, P. Marinov, R. Georgieva, Z. Zlatev),

изнесен на конференцията

- Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, IMACS MCM 2011, 29 август - 02 септември 2011 г. в Боровец.

Монте Карло анализ на чувствителността за оптимизационни задачи

Тестовите са извършени върху десет примера от Operational research library (people.brunel.ac.uk/~mastjjb/jeb/orlib/), която е общодостъпна и се ползва от разработчиците на алгоритми. Пуснати са общо над 360 000 теста. За целта е използвана грид-инфраструктурата на Института по Информационни и Комуникационни Технологии към БАН.

Методът на мравките е приложен към телекомуникационни задачи, идващи от построяването на безжични сензорни мрежи. Разработените алгоритми са реализирани на IBM BlueGene/P суперкомпютър. Получените резултати са описани и/или публикувани в [9, 23, 24, 25]. Получените резултати са докладвани на

- International Conference on Evolutionary Computation, 24 - 26 октомври 2010 г. във Валенсия, Испания,
- Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, 29 август - 2 септември 2011 год. в Боровец,

- International Conference on Information Systems and Grid Technologies, 27 - 28 май 2011 г. в София,
- International Conference on Swarm Intelligence, 14 - 15 юни 2011 г. в Париж, Франция.

1.2 Разпространение на резултатите

Постигнатите резултати са докладвани на утвърдени международни научни форуми в съответното тематично направление:

BGSIAM'09 Forth Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, December 21 - 22, 2009, Sofia, Bulgaria;

ISGT'10 International Conference on Information Systems and Grid Technologies, May 28 - 29, 2010, Sofia, Bulgaria;

SAMO'10 Sixth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output, Milan, Italy, July 19 - 22, 2010;

NM&A'10 7th International Conference on Numerical Methods and Applications, August 20 - 24, 2010, Borovets, Bulgaria;

ICNAAM'10 8th International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics, September 19 - 25, 2010, Rhodes, Greece;

AI'10 International Conference Automatics and Informatics'10, October 3 - 7, 2010, Sofia, Bulgaria;

IMCSIT'10 International Multiconference on Computer Science and Information Technology, October 18 - 20, 2010, Wisła, Poland;

ICEC'10 International Conference on Evolutionary Computation, October 24 - 26, 2010, Valencia, Spain;

BGSIAM'10 Fifth Annual Meeting of the Bulgarian Section of SIAM, December 20 - 21, 2010, Sofia, Bulgaria;

ICIFS'11 International Conference on Intuitionistic Fuzzy Sets, May 11 - 12, 2011, Burgas, Bulgaria;

ISGT'11 International Conference on Information Systems and Grid Technologies, May 27 - 28, 2011, Sofia, Bulgaria;

LSSC'11 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, June 6 - 10, 2011, Sozopol, Bulgaria;

ICSI'11 International Conference on Swarm Intelligence, June 14 - 15, 2011, Paris, France;

AMiTaNS'11 Third International Conference of the Euro-American Consortium for Promoting the Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences, June 20 - 25, 2011, Albena, Bulgaria;

IMACS MCM 2011 Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, August 29 - September 2, 2011, Borovets, Bulgaria;

В българската версия на свободната електронна енциклопедия Уикипедия е създадена статията "Алгоритъм за оптимизация по метода на мравките" (виж bg.wikipedia.org/wiki/Алгоритъм_за_оптимизация_по_метода_на_мравките).

В периода от 29.11.2010 г. до 04.12.2010 г. беше осъществено работно посещение по проекта ДТК 02/44/2009 с колегите от групата по моделиране на наностройства (Device Modelling Group) в Университета в Глазгоу, Великобритания. Ръководител на групата е проф. Асен Асенов, който също участва в проекта. Целта на посещението беше да се установи съвместна дейност при изследване на статистическите колебания на наностройства (транзистори и интегрални схеми), което е предвидено в задачите на проекта. Посещението беше структурирано като семинари и работни срещи. Домакините изнесоха серия от доклади на следните теми: physical simulation of statistical variability; compact models and statistical compact model extraction; statistical circuit simulation. Проф. Димов изнесе доклад, посветен на анализ на чувствителността за големи математически модели. Бяха осъществени няколко работни срещи, на които се проведеха дискусии относно текущите резултати и бъдещите насоки с оглед планираните задачи: адаптиране на използваните компактни модели с цел прилагане на техники за анализ на чувствителността, спецификация на начално множество от входни параметри, чието влияние да бъде изследвано, осигуряване на достъп до софтуер, с който да се генерират изходни резултати от модела, които да бъдат анализирани.

С цел задълбочаване и разширяване на знанията и уменията в съответните тематични направления, членове на колектива участваха в следните летни курсове:

- CSC Summer School in Scientific and High-Performance Computing, 12 - 20 юни 2010 г., Еспу, Финландия;
- Sixth Summer School on Sensitivity Analysis, 14 - 17 септември 2010 г., Фиезоле, Флоренция, Италия.

CSC Summer School in Scientific and High-Performance Computing (www.csc.fi/english/pages/hpc/summerschool) беше организиран от CSC - the Finnish IT Center for Science. Курсът беше структуриран в 13 модула и 5 теоретични лекции, като в края на всеки модул се провеждаха и упражнения. Курсът беше воден от специалисти в областта на научните пресмятания и съвременните изчислителни технологии, работещи в CSC - IT Center for Science. Модулите включваха: програмиране на Fortran95 и Python; паралелно програмиране с MPI и OpenMP, паралелни библиотеки (ScaLAPACK); въведение в грид и cloud пресмятанията.

The Sixth Summer School on Sensitivity Analysis (http://sensitivity-analysis.jrc.ec.europa.eu/Events/SAMO2010_Fiesole/) беше организиран от Econometrics and Applied Statistics (EAS) Unit, Joint Research Centre of the European Commission (JRC), Испра, Италия. Тази научна група е сред водещите в областта. Резултатите им са публикувани в редици статии в специализирани издания и книги. Курсът беше структуриран в модули, включващи теоретични лекции и практикуми. Лекциите бяха посветени на следните теми: въведение в анализа на чувствителността, локални и глобални техники; методи, основани на дисперсията; screening методи; Монте Карло филтриране; метамоделване.

1.3 Организиране на конференции и семинари

Колективът по проекта е участвал в подготовката и организацията на следните научни форуми:

- Специализирана сесия "Metaheuristics for optimization problems" - Seventh International Conference on Numerical Methods and Applications, August 20 - 24, 2010, Borovets, Bulgaria;
- Workshop on Computational Optimization - International Multiconference on Computer Science and Information Technologies, October 20, 2010, Wisła, Poland;
- Специализирана сесия "Applications of metaheuristics to large-scale problems" - 8th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, June 6 - 10, 2011, Sozopol, Bulgaria;
- Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, August 29 - September 2, 2011, Borovets, Bulgaria;

За втори път проф. дн Иван Димов (ръководител на настоящия проект) е председател на локалния Организационен комитет на тази конференция и домакинства това престижно международно научно мероприятие в областта на методи Монте Карло. Конференцията се организира съвместно с International Association for Mathematics and Computers in Simulation, IMACS. IMACS Seminar on Monte Carlo Methods осигурява перспективен форум за представяне на актуалните резултати в областта на анализа, реализацията и приложенията на методи и алгоритми Монте Карло. Тематичните направления включват както теоретични разработки (генериране на случайни числа, числено пресмятане на интеграли, числено решаване на интегрални и диференциални уравнения, техники за намаляване на дисперсията, методи квази-Монте Карло), така и приложно-ориентирани резултати (дифузия, статистическа физика и квантова механика, химична кинетика, финансова математика, разпространение на горски пожари). В настоящето издание на конференцията за първи път беше организирана специализирана сесия по анализ на чувствителността, с което се предостави възможност на учените от двете общности да обменят опит и да дискутират върху изследвания с мултидисциплинарен характер.

- Специализирана сесия "Stochastic Metaheuristics for Optimization Problems", Eighth IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, 29 August - 2 September 2011, Borovets, Bulgaria.

1.4 Списък на научните публикации

1.4.1 Излезли от печат

- [1] V. Atanassova, K. Atanassov. Ant Colony Optimization Approach to Tokens' Movement with Generalized Nets. - In: Proceedings of NM&A'10, 20 - 24 август, 2010, Боровец. LNCS 6046, Springer, 2011, 240-247. ISSN: 0302-9743.
- [2] I.T. Dimov, R. Georgieva. Monte Carlo Method for Numerical Integration Based on Sobol' Sequences. - In: Proceedings of NM&A'10, 20 - 24 август, 2010, Боровец. LNCS 6046, Springer, 2011, 50-59. ISSN: 0302-9743.
- [3] I.T. Dimov, R. Georgieva. Monte Carlo Approaches for Model Sensitivity Studies. - In: BGSIAM proceeding of the 5th Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM. 2011, 17 - 22. ISSN: 1313-3357.
- [4] I.T. Dimov, R. Georgieva, S. Ivanovska, Tz. Ostromsky, Z. Zlatev. Studying the Sensitivity of Pollutants' Concentrations Caused by Variations of Chemical Rates. Journal of Computational and Applied Mathematics 235 (2010), 391-402. Doi:10.1016/j.cam.2010.05.041 (IF = 1.292, 2010 г.).
- [5] S. Fidanova, K. Atanassov, P. Marinov. Start Strategies of ACO Applied on Subset Problems. - In: Proceedings of NM&A'10, 20 - 24 август, 2010, Боровец. LNCS 6046, Springer, 2011, 248-255. ISSN: 0302-9743.
- [6] S. Fidanova, K. Atanassov, P. Marinov. Comparison of ACO Behaviour with Various Start Strategies Applied on MKP. - In: Proc. of Int. Conf. of Information Systems and Grid Technologies, Sofia, Bulgaria, SBN 978-954-07-3168-1, 2010, 191-199.
- [7] S. Fidanova, K. Atanassov, P. Marinov. ACO with Semi-random Start Applied on MKP. - In: Proc. of Int. Conf. Multiconference on Computer Science and Information Technology, October 18 - 20, 2010, Wisla, Poland, 887-891. ISBN: 978-83-60810-22-4, ISSN: 1896-7094.
- [8] S. Fidanova, P. Marinov. Ant Colony Optimization Start Strategies: Two Case Studies. - In: BGSIAM proceeding of the 5th Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM. 2011, 29-35. ISSN: 1313-3357.
- [9] S. Fidanova, P. Marinov, E. Alba. ACO for Optimal Sensor Layout. - In: Proc. of Int. Conf on Evolutionary Computing, Valencia, Spain, J. Filipe and J. Kacprzyk eds., SciTePress-Science and Technology Publications, Portugal, 2010, 5-9. ISBN: 978-989-8425-31-7.
- [10] S. Fidanova, P. Marinov, K. Atanassov. Sensitivity Analysis of ACO Start Strategies for Subset Problems. - In: Proceedings of NM&A'10, 20 - 24 август, 2010, Боровец. LNCS 6046, Springer, 2011, 256-263. ISSN: 0302-9743.
- [11] S. Fidanova, P. Marinov, K. Atanassov. Generalized Net Models of the Process of Ant Colony Optimization with Different Strategies and Intuitionistic Fuzzy Estimations. - In: Proc. Jangjeon Math. Soc. ISSN: 1598-7264, Vol. 13 (1), 2010, 1-12.

- [12] S. Fidanova, P. Marinov, K. Atanassov. Adjoint Estimation of Ant Colony Optimization Start Methods. - In: BGSIAM proceeding of the 4th Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM. 2010, 29-33. ISSN: 1313-3357.
- [13] M. Magdics, L. Szirmay-Kalos, B. Tóth, Á. Csendesi, A. Penzov. Scatter Estimation for PET Reconstruction. - In: Proceedings of NM&A'10, 20 - 24 август, 2010, Боровец. LNCS 6046, Springer, 2011, 77-86. ISSN: 0302-9743, ISBN: 9783-642-18465-9.
- [14] A. Penzov, I. T. Dimov, N. Mitev, G. Sirakova, L. Szirmay-Kalos. Examining the Distribution of Sampling Point Sets on Sphere for Monte Carlo Image Rendering. American Institute of Physics Conference Proceedings, AIP 1281, 2010, 2103-2106. ISSN: 0094-243X, ISBN: 978-0-7354-0834-0.
- [15] A. Penzov, I. T. Dimov, G. Sirakova, V. Koylazov. Monte Carlo Estimator for Image Creation with Symmetric Sampling of Phong BRDF Model. American Institute of Physics Conference Proceedings, AIP 1281, 2010, 2095-2098. ISSN: 0094-243X. ISBN: 978-0-7354-0834-0.
- [16] A. Penzov, G. Sirakova, V. Koylazov, N. Mitev. New Approximation of Phong BRDF Model for Monte Carlo Image Rendering with Uniform Quadrangle Separation. - In: Proceedings of the International Conference Automatics and Informatics'10, Sofia, Bulgaria, vol. I, 2010, I-237-I-240, ISSN: 1313-1850.
- [17] Z. Zlatev, I. Dimov, I. Farago, K. Georgiev, A. Havasi, Tz. Ostromsky. Richardson Extrapolated Numerical Methods for Treatment of One-dimensional Advection Equations. - In: Proceedings of NM&A'10, 20 - 24 август, 2010, Боровец. LNCS 6046, Springer, 2011, 198-206. ISSN: 0302-9743.

1.4.2 Приети за печат

Към копията на всички публикации, приети за печат, са приложени и копия от служебните писма, удостоверяващи приемането им от съответния редактор/издател.

- [18] V. Atanassova, S. Fidanova, P. Chountas, K. Atanassov. A Generalized Net with an ACO-algorithm Optimization Component. - In: Proceedings of 8-th International Conference LSSC'11, June 6 - 10, 2011, Sozopol, LNCS, Springer. ISSN: 0302-9743 (accepted).
- [19] V. Atanassova, S. Fidanova, I. Popchev, P. Chountas. Generalized nets, ACO-algorithms and Genetic algorithm. J. of Monte Carlo Methods and Applications, Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, Berlin, Germany. ISSN: 0929-9629 (accepted).
- [20] I.T. Dimov, R. Georgieva, Tz. Ostromsky. Monte Carlo Sensitivity Analysis of an Eulerian Large-scale Air Pollution Model. Reliability Engineering & System Safety, Elsevier. Doi: 10.1016/j.ress.2011.06.007 (IF = 1.897, 2011 г., accepted).
- [21] S. Fidanova, K. Atanassov, P. Marinov. Intuitionistic Fuzzy Estimation of the Ant Colony Optimization Starting Points. - In: Proceedings of 8-th International Conference LSSC'11, June 6 - 10, 2011, Sozopol, LNCS, Springer. ISSN: 0302-9743 (accepted).

- [22] S. Fidanova, K. Atanassov, P. Marinov. Intuitionistic Fuzzy Estimation of the Ant Colony Optimization Starting Points: Part 2. - In: Proceedings of Int. Conf on Intuitionistic Fuzzy Sets, May 11 - 12, 2011, Burgas, Bulgaria (accepted).
- [23] S. Fidanova, P. Marinov. Optimal Wireless Sensor Network Coverage with Ant Colony Optimization. - In: Proc. of Int. Conf. on Swarm Intelligence, Paris, France (accepted).
- [24] S. Fidanova, P. Marinov, E. Alba. Wireless Sensor Network Layout. J. of Monte Carlo Methods and Applications, Walter de Gruyter GmbH & Co. KG, Berlin, Germany. ISSN: 0929-9629 (accepted).
- [25] S. Fidanova, M. Shindarov, P. Marinov. Optimal Sensor Layout using Multi-Objective Metaheuristic. - In: Proc. of Int. Conf. of Information Systems and Grid Technologies, 2011, Sofia, Bulgaria (accepted).
- [26] Tz. Ostromsky, I. Dimov, R. Georgieva, Z. Zlatev. Air Pollution Modelling, Sensitivity Analysis and Parallel Implementation. International Journal of Environment and Pollution. ISSN: 0957-4352 (IF = 0.626, accepted).
- [27] Tz. Ostromsky, I. Dimov, R. Georgieva, Z. Zlatev. Parallel Computation of Sensitivity Analysis Data for the Danish Eulerian Model. - In: Proceedings of 8-th International Conference LSSC'11, June 6 - 10, 2011, Sozopol, LNCS. ISSN: 0302-9743 (accepted).
- [28] Tz. Ostromsky, I. Dimov, P. Marinov, R. Georgieva, Z. Zlatev. Advanced Sensitivity Analysis of the Danish Eulerian Model in Parallel and Grid Environment. - In: Proceedings of Third International Conference AMiTaNS'11, June 20 - 25, 2011, Albena, AIP (accepted).
- [29] P. Schwaha, M. Nedjalkov, S. Selberherr, I.T. Dimov. Phonon-Induced Decoherence in Electron Evolution. - In: Proceedings of 8th International Conference on LSSC'11, June 6 - 10, 2011, Sozopol, LNCS. ISSN: 0302-9743 (accepted).
- [30] P. Schwaha, M. Nedjalkov, S. Selberherr, I.T. Dimov. Monte Carlo Investigations of Electron Decoherence due to Phonons. J. of Monte Carlo Methods and Applications (accepted).