

Инструкции и препоръки за подготовката на автореферат на български език на дисертация

Заглавната страница на автореферата се подготвя *съобразно възприетия стандарт в ИИКТ-БАН*. Заглавната страница *задължително* съдържа следната информация:

- наименование и лого на института;
- име на автора;
- заглавие на дисертацията;
- научна специалност, професионално направление;
- име на научен ръководител и научен консултант/и в случай на дисертация за присъждане на образователната и научната степен „доктор“;
- година на защита.

Втората страница от автореферата *задължително* съдържа следната информация:

- дата на провеждане на заседанието на научното звено, допуснало дисертацията до защита;
- дата, час и място на провеждане на публичната защита;
- състав на научното жури;
- кратко описание на съдържанието на дисертацията – обем, таблици, фигури, приложения, цитирани заглавия; по желание на автора може да бъде включен и броя на публикациите, на които се основава представената дисертация, H-индекса на тези публикации и вида на изданията, в които са публикувани.

Общи препоръки за автореферата:

- номерата на главите, точките, фигурите, таблиците, формулите, дефинициите, теоремите, следствията и др. в автореферата да съвпадат с тези от дисертацията;
- обикновено обемът на автореферата е около 30 - 35 страници;
- в литературата участват само заглавията, които се цитират в автореферата.

Примерна структура на автореферат

Авторефератът повтаря в общо линии структурата и съдържанието на дисертацията. Препоръчително е авторефератът да съдържа

- **Обща характеристика на дисертацията с основните секции от *Увода* на дисертацията**
 - **Актуалност на темата и обзор на основните резултати в областта**
 - **Цели и задачи на дисертацията**
 - **Методология на изследването**
 - **Апробация на резултатите**
 - **Списък на публикациите по дисертацията, като се описват и цитирания на публикациите, ако има такива.**
- **Описание на съдържанието на дисертацията в съответствие с подредбата и номерацията на главите в дисертацията**
- **Авторска справка**
- **Благодарности**
- **Литература**

На следващите страници е даден примерен автореферат.



БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ
ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ
ТЕХНОЛОГИИ

Райна Спасенкова Георгиева

ИЗЧИСЛИТЕЛНА СЛОЖНОСТ НА АЛГОРИТМИ
МОНТЕ КАРЛО ЗА МНОГОМЕРНИ ИНТЕГРАЛИ
И ИНТЕГРАЛНИ УРАВНЕНИЯ

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

НА ДИСЕРТАЦИЯ

за присъждане на образователната и научната степен „доктор“

по научна специалност 01.01.09 „Изчислителна математика“

Научен ръководител: проф. дн Иван Димов

София, 2012 г.

Дисертацията е обсъдена и допусната до защита на разширено заседание на секция „Паралелни алгоритми“ на ИИКТ-БАН, състояло се на 8 декември 2011 г.

Дисертацията съдържа 134 стр., в които 8 фигури, 13 таблици и 13 стр. литература, включваща 139 заглавия.

Защитата на дисертацията ще се състои на 27.03.2012 г. от 14:00 часа в зала 218 на блок 25А на ИИКТ-БАН на открито заседание на научно жури в състав:

1. Проф. дн Иван Димов
2. Проф. дн Светозар Маргенов
3. Проф. дн Стефка Димова
4. Доц. д-р Красимир Георгиев
5. Проф. дн Недю Попиванов

Материалите за защитата са на разположение на интересующите се в стая 215 на ИИКТ-БАН, ул. „Акад. Г. Бончев“, бл. 25А.

Автор: *Райна Спасенкова Георгиева*

Заглавие: *ИЗЧИСЛИТЕЛНА СЛОЖНОСТ НА АЛГОРИТМИ МОНТЕ КАРЛО ЗА МНОГОМЕРНИ ИНТЕГРАЛИ И ИНТЕГРАЛНИ УРАВНЕНИЯ*

Обща характеристика на дисертационния труд

Актуалност на темата и обзор на основните резултати в областта

Много приложения в областта на атомната и изчислителната физика, разпространението на светлината, финансовата математика, квантовата химия, статистическата механика, численото решаване на интегро-диференциални уравнения (уравнения на Boltzmann, пренос на частици) [30] са свързани с многомерно интегриране. Често съответните интеграли не могат да бъдат пресметнати аналитично, затова се налага прилагане на числени методи.

Методите Монте Карло (МК) са методи за приближено пресмятане на решението на задачи от изчислителната математика чрез използване на случайни процеси, като параметрите на съответния процес съвпадат с решението на задачата. Методът може да гарантира, че грешката при приближеното пресмятане на неизвестната величина е по-малка от зададена стойност с определена вероятност [18].

Методите Монте Карло се използват за оценяване на величини, които могат да бъдат представени като математическо очакване, чрез осредняване на резултатите, получени от голям брой статистически опити. Компютрите играят изключително важна роля при реализацията на такъв тип експерименти. При решаването на дадена математическа задача с предварително зададена точност, използвайки различни алгоритми Монте Карло (АМК), е важно да съществуват числови показатели, въз основа на които да се направи сравнение между алгоритмите.

Приемаме, че *алгоритъмът е система от краен брой формализирани предписания (елементарни операции) и последователността на тяхното изпълнение, гарантиращи решаването с даден числен метод на клас от еднотипни задачи с начални данни, които се изменят в определени граници.*

Прилагането на даден числен алгоритъм е съпроводено и с определяне на мярка за неговата прецизност и времето за реализацията му. Такава мярка за оценяване на числените алгоритми се дефинира с понятията трудоемкост и ефективност. При сравнението на два алгоритъма, по-ефективен е този, чиято трудоемкост е по-малка.

Дефиниция 1. (Соболь [8]). *Трудоемкост на метод Монте Карло се нарича произведението на вероятната грешка и времето, необходимо за пресмятане на една реализация на случайната величина.*

Основната компонента на грешката, която се допуска при прилагането на методи Монте Карло, произтича от вероятностния им характер, т.е. може да се твърди, че грешката е $\varepsilon(p)$, $\varepsilon > 0$, с вероятност $p \in (0; 1)$.

Ефективността на един алгоритъм е индикатор за реалното време, необходимо за пресмятането на една приближена оценка на неизвестната величина с предварително зададена точност. Ефективността е характеристика, която за-

виси от дисперсията на оценката D и времето T , необходимо за пресмятане на оценката: $eff = \frac{1}{TD}$.

Дефиниция 2. (Димов [18]). *Изчислителната сложност на алгоритъм от тип Монте Карло се дефинира като $C_N = tN$, където t е осредненото време (или брой операции), необходимо за пресмятане на една реализация на случайната величина, и N е броят на реализациите на случайната величина.*

В настоящото разглеждане *изчислителната сложност* е оценена чрез броя на операциите (аритметични и логически), необходими за приближеното пресмятане на неизвестната величина. Основна част от усилията за подобряване на методите Монте Карло се съсредоточава в конструирането на методи с намалена дисперсия, които ускоряват пресмятанията.

Преки методи Монте Карло

За приближеното пресмятане на неизвестната стойност I (например стойност на интеграл) могат да се дефинират различни оценки θ_N , използвайки N реализации на съответната случайна величина θ , чието математическо очакване съвпада с I , т.е. $E\theta = I$. Преките методи се характеризират само с един тип грешка, наречена вероятностна. Използвайки централната гранична теорема за независими еднакво разпределени случайни величини с математическо очакване I и с крайна дисперсия, за грешката $\bar{\theta}_N - I$ е показано [8], че съществува множество от оценки, зависещи от параметъра c_β , където β е означен коефициентът на доверие.

Дефиниция 3. (Соболь [8]). *Величината $R_N := c_\beta \sqrt{D\theta/N}$ се нарича вероятностна грешка. При $\beta = 0.5$ (и $c_\beta \approx 0.6745$) съответната грешка r_N се нарича вероятна, т.е.*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P \{ |\bar{\theta}_N - I| < r_N \} = \frac{1}{2} = \lim_{N \rightarrow \infty} P \{ |\bar{\theta}_N - I| \geq r_N \}.$$

Итерационни методи Монте Карло

Нека X е Банахово пространство от реални функции, функциите $f = f(x) \in X$ и $u = u(x) \in X$ са дефинирани в \mathbb{R}^d и $\mathcal{K} = \mathcal{K}u$ е линеен оператор, дефиниран върху X . Предполага се, че се търси решението на уравнението

$$u = \mathcal{K}u + f \tag{1}$$

или, по-общо, линеен функционал от решението $J(u) = (\varphi, u)$, $\varphi(x) \in X$.

Дефиниция 4. (Соболь [8]). *Итерационният процес за уравнението (1):*

$$u^{(i)} = \mathcal{K}u^{(i-1)} + f, \quad i = 1, 2, \dots$$

дефинира следния „отрязан“ ред на Neumann („truncated Neumann series“)

$$u^{(i)} = \sum_{j=0}^i \mathcal{K}^{(j)} f = f + \mathcal{K}f + \dots + \mathcal{K}^{(i-1)} f + \mathcal{K}^{(i)} u^{(0)}, \quad i = 1, 2, \dots, \tag{2}$$

където $u^{(0)}(x) \equiv f(x)$ и $\mathcal{K}^{(i)}$ е i -тата итерация на оператора \mathcal{K} .

Ако безкрайната сума (2) е сходяща, то нейната граница е решението на уравнението (1). От (2) се вижда, че всяко i -то итерационно приближение на решението u (или съответно на функционал от решението) зависи само от непосредствено предхождащото го $(i - 1)$ -во приближение. Затова произволна реализация на случайната величина, която се конструира при приближеното пресмятане на неизвестната величина по метод Монте Карло, се получава в следствие на дискретен процес на Марков [3]. Веригата на Марков с дискретен параметър $\{\theta_n, n \geq 0\}$ се счита за зададена, ако освен преходната вероятност, са известни и началните вероятности $\pi = \{\pi_i\}_i$, където π_i е вероятността случайната величина θ_0 да приема стойност i .

Тъй като с итерационните методи Монте Карло се приближава числено съответното итерационно приближение на точното решение, този клас методи се характеризира с два типа грешки:

- *систематична* грешка r_i , която зависи от броя на итерациите в процеса: $r_i = u^{(i)} - u = \mathcal{K}^{(i)}(u^{(0)} - u)$, $k = 1, 2, \dots$;
- *статистическа* грешка R_N , която зависи от броя на реализациите на веригата на Марков.

Задачата за балансиране на систематичната r_i и статистическата грешка R_N е изключително важна, когато се прилагат алгоритми от тип Монте Карло, т.е. $R_N = \mathcal{O}(r_i)$. Тази задача изисква намирането на оптимално съотношение между броя на реализациите N и средната дължина на случайните траектории, което спомага за повишаването на точността на алгоритъма, ако е фиксирана изчислителната сложност, или за намаляването на изчислителната сложност, ако е фиксирана грешката на алгоритъма (вж. [18]).

Числено интегриране с методи Монте Карло

Нека е дадена задачата за приближено пресмятане на интеграла $I[g] = \int_{\Omega} g(x)p(x)dx$, $\Omega \in \mathbb{R}^d$. Следващият израз дефинира обикновен алгоритъм МК за приближеното пресмятане на I : $\bar{\theta}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_i$, където случайните точки $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N$ са независими реализации на случайната точка ξ с вероятностна плътност $p(x)$ и $\theta_1 = g(\xi_1), \dots, \theta_N = g(\xi_N)$.

Дефиниция 6. (Атанасов и Димов [10]). Нека d и k са цели числа и $d, k \geq 1$. Разглежда се клас $W^k(\|f\|; U^d)$ от реални функции f , дефинирани в единичния куб $U^d = [0, 1]^d$, притежаващи всички частни производни от ред k

$$\frac{\partial^r f(x)}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}, \quad \alpha_1 + \dots + \alpha_d = r \leq k,$$

които са непрекъснати за $r < k$ и ограничени (по отношение на \sup норм) за $r = k$.

Съществуват два класа методи за числено интегриране върху U^d - детерминистични и стохастични (в частност методи Монте Карло). Следните резултати на Бахвалов [13, 14] указват долните граници за грешката при интегриране и в двата случая:

Теорема 1. (Бахвалов [13, 14]). *Съществува константа $c(d, k)$, така че за всяка квадратурна формула $I(f)$, която е напълно детерминистична и използва стойностите на функцията в N точки, съществува функция $f \in W^k$, такава че*

$$\left| \int_{U^d} f(x) dx - I(f) \right| \geq c(d, k) \|f\| N^{-\frac{k}{d}}.$$

Теорема 2. (Бахвалов [13, 14]). *Съществува константа $c(d, k)$, такава че за всяка квадратурна формула $I(f)$, в която участват случайни величини и стойностите на функцията в N точки, съществува функция $f \in W^k$, така че*

$$\left\{ \mathbb{E} \left[\int_{U^d} f(x) dx - I(f) \right]^2 \right\}^{1/2} \geq c(d, k) \|f\| N^{-\frac{1}{2} - \frac{k}{d}}.$$

Ясно е, че когато d е достатъчно голямо, методите, използващи случайни величини, имат предимство пред детерминистичните методи.

Дефиниция 9. (Димов [18]). *Алгоритми Монте Карло с порядък на вероятностната грешка $\mathcal{O}(N^{-\frac{1}{2} - \psi(d)})$, където $\psi(d) > 0$, а d е размерността на задачата, се наричат суперсходящи алгоритми.*

Методите Монте Карло, за които порядъкът на сходимост е $\mathcal{O}(N^{-\frac{1}{2} - \frac{k}{d}})$, са оптимални. В действителност, методи от този тип са суперсходящи (следвайки определението, дадено от Соболев в [8]) с неподобряем порядък на сходимост. Задачата за конструиране на универсален метод с такъв порядък на сходимост за произволна размерност d и стойност на k не е тривиална. В случая на $k = 1$ и $k = 2$ са известни различни методи Монте Карло за числено интегриране, които се характеризират с порядък $\mathcal{O}(N^{-\frac{1}{2} - \frac{k}{d}})$ [49, 55, 57, 62, 63].

Цели и задачи на дисертационния труд

Целта на настоящата дисертация е разработване на алгоритми от типа Монте Карло с понижена вероятностна грешка за многомерни интегрални уравнения и изследване на изчислителната сложност на алгоритмите.

Конкретните задачи за постигането на тази цел са:

1. Да се разработи и изследва адаптивен алгоритъм Монте Карло за числено интегриране.
2. Да се конструира и изследва алгоритъм за разделяне по важност за приближено решаване на интегрално уравнение на Fredholm от втори род.

3. Да се конструира и изследва мрежови алгоритъм Монте Карло за пресмятане на линейни функционали от решението на клас от интегрални уравнения на Fredholm от втори род, за които съответният ред на Neumann за получената система от линейни уравнения не е сходящ или е бавно сходящ. Да се оцени изчислителната сложност на два итерационни алгоритъма Монте Карло за решаване на интегрални уравнения на Fredholm от втори род - мрежови и немрежови.
4. Да се разработи и изследва алгоритъм Монте Карло с намалена дисперсия за числено решаване на квантово-кинетичното уравнение на Barker-Ferry в хомогенния случай.
5. Да се разработи и изследва систематизирана схема за анализ на чувствителността за модел на далечен пренос на замърсители във въздуха (Unified Danish Eulerian Model, UNI-DEM). Да се направи сравнение на резултатите, получени с обикновен и адаптивен алгоритъм Монте Карло, по отношение на изчислителната сложност на алгоритмите.

Методология на изследването

Методологията на настоящите изследвания се основава на фундаментални резултати от следните области:

- функционален анализ [39] - функционални редове (сходимость, ред на Neumann, грешка от „отрязването“ на ред („truncation error“), ред на Тейлър, оценка на остатъчния член, записан в интегрална форма), спектрална теория на оператори, резолвентни оператори [51], представяне на функции от тип ANOVA (ANalysis Of VAriance);
- теория на вероятностите [9] - случайни величини, гранични теореми, изместени и неизместени оценки, вериги на Марков;
- числен анализ [1] - апроксимация, квадратурни формули;
- оценка на изчислителната сложност на алгоритми.

Програмните кодове на конструираните алгоритми са написани на следните езици за програмиране от високо ниво - Fortran77 и C. За числените експерименти са използвани и програмни среди за пресмятания като MATLAB [70] и MATHEMATICA [69]. Паралелните пресмятания са реализирани чрез библиотеката за паралелно програмиране Message Passing Interface (MPI) [56, 68].

За генерирането на случайните числа в алгоритмите е използван т.нар. генератор Mersenne Twister (MT, [45, 73]), както и библиотеката Scalable Parallel Random Number Generators (SPRNG, [72]).

Апробация на резултатите

Резултати, включени в дисертацията, са докладвани на: съвместен семинар на секции „Паралелни алгоритми“ и „Научни пресмятания“ на ИПОИ-БАН;

семинар в Centre for Advanced Computing and Emerging Technologies (ACET), Рединг, Великобритания, 2007, 2008; информационни дни в рамките на проекта Bulgarian IST Centre of Competence in 21 Century (BIS-21++), Велинград, Хисаря, Боровец, 2006, 2007; семинар на българската секция на SIAM - BGSIAM, ИМИ-БАН, 2007 (резултатите са докладвани от съавтор), 2008.

Част от резултатите са представени на следните конференции: 7th International Conference on „Large-Scale Scientific Computations“ (LSSC'09), Созопол, България, 2009; 6th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods (MCM-2007), University of Reading, Великобритания, 2007; 7th International Conference on Computational Science, Пекин, Китай, 2007 (резултатите са докладвани от съавтор); 30th International Convention MIPRO 2007, Conference on Hypermedia and Grid Systems, Опатия, Хърватска, 2007; XIIth International Summer Conference on Probability and Statistics (ISCPS-2006), Созопол, България, 2006; 6th International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods, Juan-les-Pins, Cote d'Azur, Франция, 2004 (резултатите са докладвани от съавтор); 4th International Conference on Large-Scale Scientific Computations, Созопол, България, 2003; 4th IMACS Seminar on Monte Carlo Methods, Берлин, Германия, 2003; 5th International Conference on Numerical Methods and Applications, Боровец, България, 2002.

Списък на публикациите по дисертацията

Основните резултати по дисертацията са публикувани в:

1. Dimov, I.T., R. Georgieva. Monte Carlo Adaptive Technique for Sensitivity Analysis of a Large-scale Air Pollution Model. – In: Proc. of LSSC'09, LNCS 5910, Springer (приета за печат).
2. Dimov, I.T., R. Georgieva. Monte Carlo Algorithms for Evaluating Sobol' Sensitivity Indices. – Math. Comput. Simul., 2009.
doi:10.1016/j.matcom.2009.09.005.
3. Dimov, I.T., R. Georgieva. Complexity of Monte Carlo Algorithms for a Class of Integral Equations. – In: Proc. of ICCS'07, LNCS 4487, Part I. Springer-Verlag, 2007, 731-738.
4. Atanassov, E., R. Georgieva, T. Gurov, S. Ivanovska, A. Karaivanova, M. Nedjalkov. New Algorithms in the Grid Application SALUTE. – In: Proceeding of the 30th International Convention MIPRO 2007 (conference on Hypermedia and Grid Systems). Studio Hofbauer, Rijeka, Croatia, 2007, 217-222. ISBN 978-953-233-032-8.
5. Georgieva, R., S. Ivanovska. Importance Separation for Solving Integral Equations. – In: Proc. of LSSC'03, LNCS 2907. Springer-Verlag, 2004, 144-152.

Една от статиите е приета за печат в списанието Mathematics and Computers in Simulation (5-годишен импакт-фактор 0.965 за 2008 г.). Три от представените публикации са в Lecture Notes in Computer Science (LNCS) - поредица с

импакт-фактор (0.513 за 2004 г., 0.402 за 2005 г.). Четвъртата публикация от дадения по-горе списък, подготвена съвместно с колеги от ИПОИ-БАН, беше отличена с грамота като най-добра статия измежду всички статии, представени на конференциите, включени в конгреса MIPRO 2007 [71]. По този повод за всеки от авторите беше връчена грамота. Копие на грамотата е приложено към съответната публикация.

Има и две публикации в сборник с разширени абстракти на докладите, представени на отчетни сесии на българската секция на SIAM - BGSIAM:

1. Dimov, I.T., R. Georgieva, S. Ivanovska, Tz. Ostromsky, Z. Zlatev. Sensitivity Analysis of Air Pollution Models. – In: BGSIAM proceeding of the 3rd Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM, 2009, 28–31. ISSN: 1313-3357.
2. Atanassov, E., T. Gurov, A. Karaivanova, M. Nedjalkov, S. Ivanovska, R. Georgieva. SALUTE – Grid application for Quantum Transport. – In: BGSIAM proceeding of the 2nd Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM, 2008, C-23–C-25.

Петата статия е цитирана в:

- Dimov, I.T., A. Penzov, S. Stoilova. Parallel Monte Carlo Approach for Integration of the Rendering Equation. – In: Proc. of NMA'06, LNCS, 4310. Springer, 2007, 140-147.

Съдържание на дисертацията

Настоящата дисертация се състои от увод, три глави, заключение и списък на цитираната литература. Основното съдържание е поместено на 115 страници, а изложението е придружено с фигури и таблици. Списъкът на цитираната литература включва 142 заглавия.

Глава 1. Адаптивни алгоритми Монте Карло за многомерни интеграли

В първа глава е направена класификация на методите Монте Карло за числено интегриране според идеята при конструирането им - разделяне на дефиниционната област, адаптивност, гладкост на подинтегралната функция. Разработена е глобална адаптивна процедура, която използва само апостериорна информация за порядъка на дисперсията (стандартното отклонение), но не и за гладкостта. Резултатите, представени в тази глава, са публикувани в [22].

1.1 Класификация на методите Монте Карло за числено интегриране

1.1.1 Метод на „слоистите“ извадки

Подходът на „слоистите“ извадки („stratified sampling“; вж. [8]) се основава само на начално разбиване на областта и подходящ избор на броя на случайните

точки в съответната подобласт, което да гарантира намаляване на дисперсията в сравнение с обикновения метод Монте Карло, но не и повишаване на порядъка $\mathcal{O}(\sqrt{1/N})$ на вероятностната грешка. Избират се повече точки в областите, в които локалната дисперсия е голяма. От друга страна, при метода на „съществената извадка“ се избират повече точки в областите, в които подинтегралната функция има по-големи стойности по модул. Подходът не съдържа идеята за адаптивност (рекурсивно разделяне на подобласти) и не използва предварителна информация за гладкостта на подинтегралната функция.

1.1.2 Суперсходящ метод Монте Карло

В случая, когато освен идеята за разделяне на областта (но без рекурсивен елемент), се използва и информацията за гладкостта на подинтегралната функция, се постига повишаване на порядъка на сходимост. Първите ни известни резултати в тази насока за област $\Omega = U^d$, вероятностна плътност $p(x) = 1$ и разбиване на областта на равни части по всички направления са получени от Durach (вж. [26]).

Оказва се, че същият резултат за порядъка на сходимост може да се постигне и при по-слаби условия, а именно - само съответната функция да е непрекъснатата. Доказателството е направено от Димов и Тонев (вж. [24]).

Забележка 1.1.3. Грешката на най-добрата квадратурна формула според [7] за класа от функции $W_{L_p}^r(L; [a, b])$, притежаващи абсолютно непрекъснатата производна от ред $r - 1$ и производна от ред r , чиято норма в L_p е ограничена, има порядък $\mathcal{O}(N^{-r})$ (вж. [5, 6]), където N е броят на възлите на квадратурната формула.

Оценка с повишен порядък за дисперсията, подобна на получената от Durach, може да се изведе и за клас от функции, чиито производни от по-висок ред са ограничени, като се добавят допълнителни условия за избора на случайните точки в подобластите. Твърдението е формулирано в следната теорема:

Теорема 1.1.4. Нека е дадена област $\Omega \in \mathbb{R}^d$ и разделяне на областта $\Omega = \sum_{j=1}^M \Omega_j$, където всяка от подобластите Ω_j е централно-симетрична с център s_j . Нека $\xi^{(j)}$ е случайна d -мерна точка, равномерно разпределена в Ω_j , а $\xi^{(j)'}$ е симетрична (относно центъра s_j) с $\xi^{(j)}$, т.е. $\xi^{(j)} + \xi^{(j)'} = 2 s_j$. Ако частните производни от първи и втори ред на функцията $g(x)$ са непрекъснати в Ω и за всички $k, l = 1, \dots, d$ е в сила, че

$$\frac{\partial^2 g}{\partial x_k \partial x_l} \leq L \quad \text{и} \quad d_j = \sup_{x_1, x_2 \in \Omega_j} |x_1 - x_2| \leq \frac{c_1}{N^{1/d}},$$

тогава $D \bar{\theta}_N^{**} = c_2 L^2 N^{-1-4/d}$, където $\bar{\theta}_N^{**} = \sum_{j=1}^M \frac{V_j}{2} [g(\xi^{(j)}) + g(\xi^{(j)'})]$,

V_j е обемът на подобластта Ω_j и $c_2 = (0.5d^2 c_1^{d+2})^2$.

1.1.3 Адаптивен метод Монте Карло

Обикновеният адаптивен метод Монте Карло (или само адаптивен метод Монте Карло) не използва априорна информация за гладкостта на подинтегралната функция. Основната идея е концентриране на случайни точки в подобластите, в които дисперсията е голяма (по отношение на предварително зададена точност). Подходът се основава на рекурсивно разделяне на областта, използвайки апостериорна информация за грешката при текущото разделяне. Този адаптивен алгоритъм дава приближение с грешка $\varepsilon \leq c N^{-1/2}$, където $c \leq 0.6745\sigma(\theta)$ ($\sigma(\theta)$ е стандартното отклонение), но порядъкът е същият както при обикновения алгоритъм Монте Карло.

Съществуват различни подходи от тип Монте Карло за числено интегриране, чийто порядък на сходимост е $\mathcal{O}\left(N^{-\frac{1}{2}-\frac{k}{d}}\right)$. Но докато за $k = 1$ и $k = 2$ тези методи сравнително лесно могат да бъдат конструирани, следвайки идеите на Dirach за $k = 1$, то при $k \geq 3$ не е така. За разлика от теоремите на Бахвалов, които дават теоретична оценка за оптималния порядък на сходимост на детерминистична и стохастична квадратурна формула, Атанасов и Димов [10] формулират условия за конструиране на метод с оптимален порядък на сходимост за d -мерни функции от класа W^k , като използват метода на контролиране на дисперсията върху части (във всяка подобласт) интерполационни полиноми на Лагранж и информация за гладкостта на подинтегралната функция.

1.1.4 Суперсходящ адаптивен метод Монте Карло

В Секция 2.1, Подсекция 2.1.3 е описан суперсходящ метод, наречен разделяне по важност („importance separation“) [17, 42, 43].

Забележка 1.1.6. *Макар и методът на разделяне по важност да се характеризира с порядък на сходимост от ред $\mathcal{O}\left(N^{-\frac{1}{2}-\frac{1}{d}}\right)$ за класа от функции W^1 , константата в оценката за вероятната грешка е по-малка в сравнение с константата за алгоритмите от типа на Dirach (Теорема на Dirach, Теорема 1.1.3) (вж. [18, 43]).*

1.2 Адаптивен алгоритъм Монте Карло

Реализираният тук адаптивен алгоритъм не използва никаква предварителна информация за гладкостта на подинтегралната функция, но използва апостериорна информация за дисперсията. Алгоритъмът започва с разделяне на интервалите по всички направления на M подинтервала, като M е зададено като входящ параметър. Във всяка подобласт се пресмята стойността на съответния интеграл I_{Ω_j} , $j = 1, \dots, M$ и дисперсия. След това получената дисперсия се сравнява с предварително зададена стойност. Получената информация се използва за следващото съгъстяване, тъй като подобластта с най-голямо стандартно отклонение се разделя на 2^d нови подобласти. Изпълнението на алгоритъма спира, когато за стандартното отклонение е достигната предварително зададената точност ε във всички подобласти, получени след делението (или когато е достигнат предварително зададен максимален брой на нивата на разделяне или

Таблица 1.2: Относителна грешка и изчислително време за $d = 18$, $I[f] = 9.919\mathbf{e-06}$, $a = \left(\frac{1}{9}, \frac{2}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{9}, \frac{2}{27}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{4}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{2}{27}, \frac{2}{27}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}, \frac{4}{27}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9}\right)$.

Адаптивен алгоритъм МК				Обикновен алгоритъм МК			
N	$I_N[f]$	Отн. гр.	Време (s)	N	$I_N[f]$	Отн. гр.	Време (s)
10	9.923e-06	0.0005	7	2621440	9.89e-06	0.002	6
10 ²	9.918e-06	0.00005	75	26214400	9.09e-06	0.084	60
10 ³	9.919e-06	0.00008	758	262144000	5.10e-06	0.48	600

на подобластите, в които не е изпълнен стоп-критерият). Така се получава едно приближение на интеграла $I = \sum_j I_{\Omega_j}$, $j = 1, \dots, M^d$ с подход Монте Карло.

Изследвана е ефективността (относителна грешка и изчислително време) на разработения адаптивен алгоритъм Монте Карло за интегрални с тестови функции на Genz [31] с различни размерности. Получените резултати потвърждават намаляването на дисперсията - за приблизително еднакво изчислително време адаптивният алгоритъм води до относителна грешка, няколко пъти по-малка в сравнение с грешката на обикновения алгоритъм МК (вж. Таблица 1.2). Проблемът е, че необходимият брой реализации за сравнението между споменатите алгоритми нараства експоненциално по отношение на размерността.

Резултатите от проведените числени експерименти се обобщават така:

- и двата подхода от тип МК (обикновен и адаптивен) са приложими за конкретния клас от функции;
- обикновеният МК има предимство при сравнително малки размерности, когато изискваната точност не е много голяма (например относителна грешка до 10%);
- адаптивният алгоритъм има предимство при сравнително големи размерности - относителната грешка е приблизително 0.01% и изчислителната сложност е сравнително малка.

Глава 2. Алгоритми Монте Карло за интегрални уравнения

2.1 Алгоритъм на разделяне по важност

В първа секция на втора глава се разглежда задачата за приближено пресмятане на линеен функционал (φ, u) от решението на интегрално уравнение:

$$u(x) = \int_{\Omega} k(x, x')u(x')dx' + f(x), \quad x, x' \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \quad \text{или} \quad u = \mathcal{K}u + f,$$

където \mathcal{K} е интегрален оператор, $k(x, x') \in L_2(\Omega \times \Omega)$, $f(x) \in L_2(\Omega)$ са дадени функции, $u(x) \in L_2(\Omega)$ е неизвестна функция, Ω е ограничена област.

Целта е конструиране и изследване на алгоритъм Монте Карло за разделяне по важност за пресмятане на линейни функционали от решението на интегрално уравнение на Fredholm от втори род. В много задачи от статистическата физика се налага пресмятането на линеен функционал от решението на уравнение на Boltzmann, Wigner или Schrödinger, например определяне на вероятността за попадането на частица във фиксирана точка от пространството или в даден момент от времето, определяне на средна скорост на частиците или енергията.

Приближение на неизвестната стойност на линейния функционал при достатъчно голямо i (в зависимост от нормата на интегралния оператор) може да се получи като по метода на последователните приближения се конструира „отрязан“ ред на Neumann:

$$(\varphi, u^{(i)}) = (\varphi, f) + (\varphi, \mathcal{K}f) + \dots + (\varphi, \mathcal{K}^{(i-1)}f) + (\varphi, \mathcal{K}^{(i)}f),$$

където за $t = (t_0, \dots, t_j) \in G \equiv \Omega^{j+1} \subset \mathbb{R}^{d(j+1)}$:

$$(\varphi, \mathcal{K}^{(j)}f) = \int_G \varphi(t_0)k(t_0, t_1) \dots k(t_{j-1}, t_j)f(t_j)dt_0 \dots dt_j.$$

Следователно началната задача за решаване на интегрални уравнения се свежда до задача за приближено пресмятане на краен брой многомерни интеграли от вида: $I(j) = (\varphi, \mathcal{K}^{(j)}f) = \int_G F(t)dt$, $t \in G \subset \mathbb{R}^{d(j+1)}$.

2.1.2 Метод на разделяне по важност за интеграли

Методът на разделяне по важност („importance separation“, IS) е метод Монте Карло, който обединява идеята за разделяне на областта на интегриране на равномерно малки подобласти и метода на съществената извадка („importance sampling“, [37]). Този метод има оптимален порядък на сходимост за класа от функции с ограничени производни.

Един подход за разделяне на подобласти е предложен от Димов и Караиванова [43]. Разглежда се задачата за пресмятане на следния интеграл $I(j) = \int_G F(t)dt$, $G \equiv \Omega^{j+1} \subset \mathbb{R}^n$, $n = d(j+1)$. В едномерния случай схемата за разделяне на областта $G = [a; b]$ на M непресичащи се подинтервали $G_l \equiv [x_{l-1}, x_l]$, $l = 1, \dots, M-1$, е следната:

$$\begin{aligned} C_i &= \frac{1}{2}[F(x_{i-1}) + F(x_M)](x_M - x_{i-1}), & i &= 1, \dots, M-1, \\ x_i &= x_{i-1} + \frac{C_i}{F(x_{i-1})(M-i+1)}, & x_0 &= a, \quad x_M = b. \end{aligned} \quad (3)$$

Известно е [8], че

$$E\bar{\theta}_N^*(j) = I(j), \quad \text{където } \bar{\theta}_N^*(j) = \sum_{i=1}^{M^n} \frac{V_{G_i}}{N_i} \sum_{l=1}^{N_i} F(\xi_l^i), \quad \sum_{i=1}^{M^n} N_i = N,$$

и ξ_l^i е l -тата реализация на случайна точка в i -тата подобласт на G .

В общия случай на многомерни интеграли ($G \subset \mathbb{R}^n$) е в сила следната оценка за грешката при интегриране (вероятна грешка) [43]:

$$r_N \leq \sqrt{2n} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{L}_i c_{1_i} \hat{c}_{2_i})^2 \right]^{\frac{1}{2}} N^{-\frac{1}{2} - \frac{1}{n}}, \quad M^n = N, \quad (4)$$

където n е размерността на областта на интегриране, M е броят на подинтервалите по всяко от направленията, подинтегралната функция $F(t)$ е положителна функция и принадлежи на $W^{(1)}(L, G)$. Константите c_{1_i} ($i = 1, \dots, M^n$) и векторите от константи $c_{2_i} \in \mathbb{R}^n$ са определени от изискването подобластите G_i , $i = 1, \dots, M^n$, да са равномерно малки по вероятност и по площ (в геометричен смисъл) и се предполага, че $\hat{c}_{2_i} = \max_l c_{2_{i_l}}$.

От (4) е ясно, че грешката на метода на разделяне по важност има следния порядък $\mathcal{O}(N^{-1/2-1/n})$, който асимптотично клони към $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ за големи размерности n . Тази оценка на грешката при интегриране показва, че методът на разделяне по важност е подходящ за приближено пресмятане на интеграли, ако n не е много голямо. Следователно в термините на интегрални уравнения това означава, че редът на Neumann трябва да е бързо сходящ.

2.1.3 Описание на алгоритъма

Нека $G = [a; b] \subset \mathbb{R}^1$. За прилагането на метода на разделяне по важност могат да се използват различни подходи. Тук е използвана следната опростена схема: броят на подинтервалите и точките на разделяне са еднакви за всички направления и всички компоненти на следващата точка от разделянето са еднакви.

Съществена стъпка при реализацията на алгоритъма на разделяне по важност е разделянето на подобласти. Точките на разделянето се получават като се следва идеята подобластите да бъдат с еднакъв обем. Първата и последната точка на разделянето са фиксирани - те съвпадат с границите на разглежданата област (в случая интервал). Този подход на разделяне не би могъл да се приложи за функции, които се анулират в някои подобласти, тъй като във формулите за определяне на точките на разделянето се използва стойността на подинтегралната функция в левия край на интервала. От друга страна, формула (3) е приложима, ако е изпълнено следното неравенство:

$$\frac{C_i}{F(x_{i-1})(M-i+1)} \leq x_M - x_{i-1}.$$

Това неравенство може да се превърне в условие за броя на подинтервалите:

$$M \geq i - \frac{1}{2} + \frac{F(x_M)}{2F(x_{i-1})}, \quad i = 1, \dots, M-1. \quad (5)$$

Очевидно е, че M ще стане прекалено голямо, когато $F(x_{i-1})$ приема стойности, близки до нулата за някой индекс $i \in (1; M-1)$. Както беше коментирано и по-рано, методът на разделяне по важност е подходящ за подинтегрални функции, които се характеризират с подобласти с различен „принос“. От друга страна, формула (5) показва, че ако отношението на стойностите на подинтегралната

функция в десния край на интервала и в някоя вътрешна точка е голямо, M също ще стане прекалено голямо. Но това предизвиква проблем от изчислителна гледна точка - M ще расте експоненциално, тъй като във всяка подобласт трябва да бъде получена поне една приближена стойност.

2.1.4 Анализ на грешката

Итерационното приближение на u с индекс i ($i \geq 0$) е означено с $u^{(i)}$, а приближението, получено с метод Монте Карло - с \tilde{u} . Ако ε е предварително зададен достатъчно малък положителен параметър, то

$$|(\varphi, u) - (\varphi, \tilde{u})| \leq |(\varphi, u) - (\varphi, u^{(i)})| + |(\varphi, u^{(i)}) - (\varphi, \tilde{u})| = \varepsilon_i + \varepsilon_N < \varepsilon,$$

където ε_i е систематичната грешка, ε_N е вероятностната грешка. Като се използва [16] се получава оценка за броя i на итерациите за достигането на предварително зададената точност:

$$i > \frac{\ln \frac{\varepsilon}{2|(\varphi, u^{(0)}) - (\varphi, u)|}}{\ln \|\mathcal{K}\|_{L_2}},$$

където $u^{(0)}$ е началното приближение на u . Използва се неравенството на Cauchy-Bunyakovski: $|(\varphi, u^{(0)}) - (\varphi, u)| \leq \|\varphi\|_{L_2(\Omega)} \|u^{(0)} - u\|_{L_2(\Omega)}$. Вторият множител може да бъде оценен така:

$$\|u^{(0)} - u\|_{L_2(\Omega)} \leq (\|I\|_{L_2} + \|\mathcal{K}\|_{L_2} + \dots + \|\mathcal{K}\|_{L_2}^i + \dots) \|r^{(0)}\|_{L_2(\Omega)},$$

$$\text{където } r^{(j)} = f - u^{(j)} - \mathcal{K}u^{(j)}, \quad j = 0, 1, \dots$$

След граничен преход при $i \rightarrow \infty$ се получава $\|u^{(0)} - u\|_{L_2} \leq \frac{\|r^{(0)}\|_{L_2(\Omega)}}{1 - \|\mathcal{K}\|_{L_2}}$. Последното неравенство е в сила, ако е изпълнено условието $\|\mathcal{K}\|_{L_2} < 1$.

2.1.5 Метод Монте Карло за интегрални уравнения

В съответствие с началната $\pi(x)$ и преходните $p(x, x')$ вероятности в Ω се конструира случайна траектория (верига на Марков) T_i с дължина i , стартираща със състояние x_0 : $T_i: x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_i$. Известно е [8], че

$$E\theta_i[\varphi] = (\varphi, u^{(i)}), \quad \text{където } \theta_i[\varphi] = \frac{\varphi(x_0)}{\pi(x_0)} \sum_{j=0}^i W_j f(x_j),$$

$$W_0 = 1, \quad W_j = W_{j-1} \frac{k(x_{j-1}, x_j)}{p(x_{j-1}, x_j)}, \quad j = 1, \dots, i,$$

и съответната оценка по метод МК за $(\varphi, u^{(i)})$ е: $(\varphi, u^{(i)}) \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \theta_i[\varphi]_n$.

Следователно случайната величина $\theta_i[\varphi]$ може да се разгледа като оценка за търсената стойност (φ, u) при достатъчно голямо i с вероятностна грешка с порядък $\mathcal{O}(N^{-1/2})$, където N е броят на реализациите на веригата на Марков, а $\theta_i[\varphi]_n$ е стойността на $\theta_i[\varphi]$, получена върху n -тата траектория.

2.1.6 Числени експерименти

Алгоритъмът на разделяне по важност е конструиран, така че във всяка подобласт се избира само една реализация на съответната случайна величина. Броят на итерациите d е фиксиран, но той е избран според L_2 -нормата на ядрото на интегралния оператор. За приближеното пресмятане на интеграла $I(j)$, $j = 0, \dots, i$ са избрани различен брой реализации с цел балансиране на грешката. Резултатите, получени с алгоритъма на разделяне по важност (Разд. по важност), са сравнени с обикновения метод Монте Карло (ОбММК) за пресмятане на интеграли и с метода Монте Карло за решаване на интегрални уравнения (ММК-инт.ур.). Резултатите са представени в Таблица 2.2. Тя илюстрира свойството на описания алгоритъм за намаляване на дисперсията, което води до по-малка относителна грешка при фиксиран брой итерации и реализации. Изчислителното време за алгоритъма на разделяне по важност малко надхвърля времето за обикновения алгоритъм МК, поради допълнителните пресмятания, необходими за разделянето на областите. От друга страна, изчислителното време на алгоритъма МК за интегрални уравнения е с няколко пъти по-голямо, поради използването на метода на селекцията („acceptance-rejection method“) за моделиране на началната вероятностна плътност (в общия случай е необходимо моделиране и на преходните вероятности).

Методът на разделяне по важност дава по-добра точност в сравнение с обикновения метод Монте Карло и метода за решаване на интегрални уравнения, когато редът на Neumann е бързо сходящ. Обикновеният метод Монте Карло има известно предимство пред метода на разделяне по важност по отношение на точността, когато размерността се увеличава. Това може да се обясни с факта, че за големи размерности n грешката на метода на разделяне по важност клони асимптотично към $\mathcal{O}(N^{-1/2})$, което съответства на грешката на обикновения метод Монте Карло.

Таблица 2.2: Абсолютна и относителна грешка при приближеното пресмятане на (φ, u) , използвайки обикновен алгоритъм МК за интеграли, алгоритъм МК за интегрални уравнения и алгоритъм на разделяне по важност при фиксиран брой итерации i .

i	ε_i	N						ОбММК		Разд. по важн.		ММК-инт.ур.		
		N_0	N_1	N_2	N_3	N_4	N_5	Абс.	Отн.	Абс.	Отн.	N	Абс.	Отн.
1	1.39	10	8^2	-	-	-	-	2.83	0.315	1.28	0.143	360	1.29	0.145
2	0.54	10	8^2	5^3	-	-	-	1.87	0.209	0.55	0.061	540	0.55	0.062
3	0.21	100	8^2	5^3	8^4	-	-	0.22	0.024	0.05	0.006	4096	0.31	0.034
4	0.08	10	8^2	5^3	8^4	4^5	-	1.41	0.157	0.07	0.008	11600	0.08	0.009
5	0.03	100	10^2	10^3	10^4	5^5	6^6	0.13	0.084	0.01	0.001	37000	0.03	0.004

2.2 Преобусловен мрежови алгоритъм Монте Карло

Във втора секция на втора глава е представен и изследван *мрежови* алгоритъм Монте Карло за пресмятане на линейни функционали от решението на специфичен клас от интегрални уравнения. Дадено е интегрално уравнение на Fredholm от втори род:

$$u(x) = \lambda \int_{\Omega} k(x, x')u(x')dx' + f(x), \quad x, x' \in \Omega \subset \mathbb{R}^d, \quad \text{или} \quad u = \lambda \mathcal{K}u + f, \quad (6)$$

където \mathcal{K} е интегрален оператор, $\mathcal{K} : L_p \mapsto L_p$, и

$$\begin{aligned} k(x, x') &\in L_p^x(\Omega) \cap L_q^{x'}(\Omega), & p, q \in \mathbf{Z}, p, q \geq 0, \\ f(x) &\in L_p(\Omega), & \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1. \end{aligned}$$

Неизвестната функция е $u(x) \in L_p(\Omega)$ и Ω е затворена и ограничена област.

Разглежда се задачата за конструиране на метод Монте Карло за пресмятането на линейни функционали от решението на уравнението (6) от следния вид:

$$J(u) = \int_{\Omega} \varphi(x)u(x)dx = (\varphi, u), \quad \text{за } \lambda = \lambda_*, \quad \varphi(x) \in L_q(\Omega), \quad q \geq 0, \quad q \in \mathbf{Z}, \quad (7)$$

при предположение, че съответният ред на Нойман не е сходящ или е бавно сходящ.

Алгоритъмът, представен и изследван тук, обединява два известни подхода за решаване на интегрални уравнения и съответно, системи от линейни алгебрични уравнения (СЛАУ). Чрез първия подход дадено интегрално уравнение се свежда до СЛАУ, като се използва някоя квадратурна формула (квадратурен метод). Грешката от апроксимация на тази стъпка е:

$$\lambda \sum_{i=1}^m h_i \rho_1(x_i; m, k, u) + \rho_2(m, \varphi, u),$$

където $h_i = A_i \varphi(x_i)$, $h \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, $\{A_j\}_{j=1}^m$ е множеството от теглата, а точките $\{x_j\}_{j=1}^m$ са възлите на избраната квадратурна формула, $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_m \leq b$. Тук с $\rho_1(x_i; m, k, u)$, $x \in \Omega$ е означена грешката при апроксимацията на интегралното уравнение със съответна СЛАУ. С $\rho_2(m, \varphi, u)$ е означена грешката от апроксимацията на линеен функционал от решението на интегралното уравнение. Порядъкът на грешките ρ_1, ρ_2 зависи от избраната кубатурна формула, областта на интегриране и класа, към който принадлежи подинтегралната функция. Затова нека да предположим, че приложената кубатурна формула е точна за всички полиноми на d променливи от степен $m - 1$, подинтегралната функция е m -пъти диференцируема в Ω , а всичките ѝ частни производни от ред $(m + 1)$ са непрекъснати в Ω . Следователно, подинтегралната функция $q(x)$ може да се представи в следния вид:

$$q(x) = \mathcal{P}(x) + \mathcal{R}(x),$$

където $\mathcal{P}(x)$ е развитието на $q(x)$ в ред на Taylor с m събираеми, а $\mathcal{R}(x)$ е остатъчният член, записан в интегрална форма. Грешката на кубатурната формула може да се разглежда като линеен функционал върху класа от функции, удовлетворяващи направените по-горе предположения:

$$\Lambda_m^x[q] = \int_{\Omega} q(x) dx - \mathcal{C}(\omega, \xi), \quad \text{където } \mathcal{C}(\omega, \xi) = \sum_{j=1}^m \omega_j q(\xi_j). \quad (8)$$

Като се използва израза за остатъчния член $\mathcal{R}(x)$, се получава аналог на Теоремата на Пеано в многомерния случай:

Теорема 2.2.1. $\mathcal{R}(x) = \sum_{n=1}^d$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{\nu=1}^{k-n} \sum_{s=1}^{\zeta} \int_{\Pi_s^n} \left\{ \sum_{j=1}^d (x_j - \alpha_j) \frac{\partial}{\partial x_j} \right\}_{v, v \neq s}^{k-n-\nu} \left\{ \sum_{i=1}^d (x_i - t_i) \frac{\partial}{\partial x_i} \right\}_s^{\nu} \frac{\partial^n q}{\partial x_{s_1} \dots \partial x_{s_n}}(t, \alpha) dV_{\Pi_s^n}, \quad n < k, \\ \sum_{s=1}^{\zeta} \int_{\Pi_s^n} \frac{\partial^n u}{\partial x_{s_1} \dots \partial x_{s_n}}(x, t, \alpha) dV_{\Pi_s^n}, \quad n = k, \end{array} \right.$$

където $\Pi_s^n = \{g = (g_1, g_2, \dots, g_n)\} \in \mathbb{R}^n : \alpha_{s_i} \leq g_i \leq x_{s_i}, i = 1, 2, \dots, n, (s_1, \dots, s_n)_s \in C_d^n\{1, 2, \dots, d\}\}.$

$$(t, \alpha) = \{(t, \alpha)_i\}_{i=1}^d, \quad (t, \alpha)_i = \begin{cases} t_i, & i \in \{s_1, \dots, s_n\} \\ \alpha_i, & \text{иначе.} \end{cases}$$

$$(x, t, \alpha) = \{(x, t, \alpha)_i\}_{i=1}^d, \quad (x, t, \alpha)_i = \begin{cases} t_i, & i \in \{s_1, \dots, s_n\}, \\ x_i, & i < s_1, \\ \alpha_i, & \text{иначе.} \end{cases}$$

За да бъдат горните граници на интеграла независими от x , са взети положителните части на събираемите в описаните по-горе суми. Така

$$|\Lambda_m^x[q]| \leq c \sum_{n=1}^d \sum_{\nu=1}^{k-n} \sum_{s=1}^{\zeta} Q^{(k)} \int_{\Pi_s^n} |K_{v,s}^{k-n-\nu,\nu}(\mathcal{C}, t)| dV_{\Pi_s^n}, \quad n < k,$$

където c е константа, а функциите $K_{v,s}^{k-n-\nu,\nu}(\mathcal{C}, t)$ се наричат „ядра на Сард“ за кубатурната формула $\mathcal{C}(\omega, \xi)$ и се дефинират със следната формула [27]:

$$K_{v,s}^{k-n-\nu,\nu}(\mathcal{C}, t) \equiv \Lambda_m^x \left[\left\{ \sum_{j=1}^m (x_j - \alpha_j)_+ \right\}_{v, v \neq s}^{k-n-\nu} \left\{ \sum_{i=1}^m (x_i - t_i)_+ \right\}_s^{\nu} \right].$$

Вижда се, че грешката на кубатурната формула зависи от частните производни на подинтегралната функция $q(x)$ от ред m . След m -кратно диференциране на даденото уравнение и прилагане на правилото за диференциране на произведение (правило на Leibnitz) се получават оценки, аналогични на оценките в едномерния случай, дадени в работите на Канторович и Крылов [41].

Вторият подход е итерационен метод Монте Карло (резолвентен метод), приложен към получената СЛАУ след апроксимацията. Спецификата на задачата (апроксимация на интегрално уравнение със СЛАУ) определя характерната структура на матрицата на получената СЛАУ. Елементите на матрицата в съседни редове имат приблизително равни стойности, т.е. редовете са зависими, откъдето следва, че детерминантата е приблизително нула. Следователно, от една страна, най-малките по модул собствени стойности са близки до нулата, а от друга в съответствие с предположението за бавно сходящ или разходящ ред на Нойман съществуват и много големи по абсолютна стойност собствени стойности. Това определя голямо число на обусловеност, т.е. матрицата е лошо обусловена. С цел преодоляване на тази изчислителна трудност е приложено аналитично продължение на реда чрез смяна на спектралния параметър [19, 44, 52]. Основното предимство на използваната техника за ускоряване на сходимостта е несъщественото влияние на приложената процедура върху изчислителната сложност на описания алгоритъм за интегрални уравнения.

За решаването на разглежданата задача се следва следната схема: задава се точността ϵ , с която приближената стойност да апроксимира търсената. В зависимост от нея се определя реда на матрицата, дължината и броя на реализациите на веригата на Марков. Таблица 2.4 демонстрира работоспособността на този подход - въпреки че за началните данни редът на Neumann не е сходящ, след прилагане на конструирания алгоритъм се получава приближение със зададената точност. Освен това, могат да се получат сравнително добри оценки за дължината на траекторията и броя на реализациите на случайната величина, които могат да се използват при числените експерименти на практика. Оценката за реда на матрицата зависи от поведението на подинтегралната функция (тази оценка е по-груба в сравнение с другите две). Установено е експериментално, че редът на матрицата влияе несъществено върху спектралните свойства на матрицата.

Оценка за вероятната грешка на предложения метод може да се получи, като се използва емпирична оценка на дисперсията, ако дисперсията на конструираната случайна величина е крайна. В [52] са дадени достатъчни условия за това дисперсията да е ограничена. В частност, за класа конформни изображения, съдържащо избраното за настоящите изследвания изображение, условието е: $\frac{c|\eta_*|}{1-|\eta_*|} < 1$, където $\psi(\eta) = c_1\eta + c_2\eta^2 + \dots$ и $|c_i| < c$, $i \geq 1$. Параметрите и коефициентите на изображението са фиксирани на основата на предварително зададена информация за спектъра на итерационната матрица. Следователно това условие е зададено спрямо спектралния параметър λ_* . Параметърът λ_* , използван в конкретния пример не удовлетворява условията на теоремата на Sabelfeld [39]. Следователно в случая не е в сила твърдението за ограниченост на дисперсията. При липса на ограниченост описаната задача е доста предизвикателна. В този случай оценка на вероятната грешка на метода може да се получи чрез други техники и подходи, описани в [28, 38, 64].

Изследвана е устойчивостта на избраното изображение. Когато изображе-

Таблица 2.4: Грешка при приближеното пресмятане на (φ, u) с итерационен метод Монте Карло за СЛАУ при предварително зададена точност.

Зададена точност ε	Дължина на веригата на Марков i	Брой на реал. на веригата на Марков N	Прибл. стойност	Абс. грешка
0.1	5	970	2.17371	0.06351
0.01	12	9 500 000	2.10306	0.00713
0.001	15	111 111 000	2.11066	0.00047

нието има някои особености и проявява чувствителност спрямо изменения в параметрите, е възможно итерационният процес да не клони към търсената стойност. Получените резултати показват, че изображението ψ (ψ^{-1}) е устойчиво относно параметрите, от които зависи.

2.3 Изчислителна сложност на алгоритми Монте Карло за клас от интегрални уравнения

Анализирана е изчислителната сложност на два подхода за решаване на интегрални уравнения с предварително зададена точност ε и при изискването за постигане на добър баланс между *вероятностната* и *систематичната* грешка. Тези подходи спадат към итерационните методи Монте Карло и се характеризират със сходен порядък на изчислителната сложност. Резултатите, представени в тази секция, са публикувани в [21].

Мрежови алгоритъм Монте Карло

За да се оцени изчислителната сложност на алгоритъм Монте Карло (АМК), е необходимо да се разгледа математическото очакване $ET(\mathcal{A})$ на времето, необходимо за решаването на задачата с алгоритъм \mathcal{A} (вж. [25]). Нека с l_A и l_L е означен съответно броят на аритметичните и логическите подоперации. Времето, необходимо за изпълнение на една подоперация, е означено с τ .

Кубатурен алгоритъм. Изчислителната сложност е оценена за дадена кубатурна формула:

$$T(\mathcal{CA}) > \tau [c^s(p_k + 1)\varepsilon^{-s} + c^{-s/2}(p_f + p_\varphi + p_{node})\varepsilon^{-s/2} + p_{coef}] l_A,$$

където константата c зависи от следните параметри

$$c = c(\lambda, K_x^{(r)}, K_t^{(r)}, F^{(r)}, \Phi^{(r)}), \quad r = 1, \dots, ACT + 1, \quad s = s(ACT) \quad (9)$$

(ACT е съкращение на алгебрична степен на точност на избраната кубатурна формула). Броят на аритметичните операции, необходими за пресмятането на една стойност на функциите $k(\mathbf{x}, \mathbf{t})$, $f(\mathbf{x})$ и $\varphi(\mathbf{x})$ и на един възел (коэффициент), са означени съответно с p_k , p_f и p_φ , и с $p_{node}(p_{coef})$.

Степента s и константите p_{node} и p_{coef} зависят от приложената формула.

Например $s = 1$ за формулите на правоъгълниците или трапеците и $s = 1/2$ за формулата на Симпсън.

Резолвентен алгоритъм Монте Карло. Най-напред се разглежда случая на сходимост на реда на Нойман (допуска се и да е бавно сходящ).

За един преход в случайната траектория са необходими следния брой операции:

- генериране на едно случайно число: k_A аритметични и k_L логически операции;
- моделиране на началната/преходната вероятност π с цел определяне на началната **или** следващия елемент във веригата на Марков: μ_A аритметични и μ_L логически операции ($E\mu_A + 1 = E\mu_L = \mu$, $1 \leq \mu \leq m - 1$);
- пресмятане на една стойност на случайната величина: 4 аритметични операции.

Броят на аритметичните операции, необходими за предварителното пресмятане на началната π и переходните P вероятности (съответно вектор и квадратна матрица), е пропорционален на реда на матрицата m : $2m(1 + m)$.

Броят на преходите i се избира от неравенството:

$$i > \ln^{-1} \alpha (\ln \varepsilon + \ln(1 - \alpha) - \ln \|b\|_2) - 1 \quad (\text{предполагайки } \|b\|_2 > \varepsilon(1 - \alpha)),$$

за да се гарантира порядък ε , като $\alpha = |\lambda| \|L\|_2$, а за начално приближение е избрана дясната страна b .

За да се достигне вероятна грешка ε , са необходими N траектории, като броят им се определя от $N > c_{0.5} \sigma^2(\theta) \varepsilon^{-2}$, $c_{0.5} \approx 0.6745$, където θ е случайната величина, чието математическо очакване съвпада с неизвестния линеен функционал. Следователно в сила е следната теорема:

Теорема 2.3.1. *За математическото очакване на времето, необходимо за получаване на приближение с точност ε , като се използва разглеждания резолвентен АМК, е валидна следната оценка:*

$$ET(\mathcal{RMSA}) > \tau [(k_A + \mu + 3)l_A + (k_L + \mu)l_L] \frac{[c_\beta \sigma(\xi_j^{\mathcal{R}}[h])]^2}{\ln^3 \alpha} \frac{(\ln^3 \varepsilon + a)}{\varepsilon^2} + 2\tau m(m + 1)l_A,$$

където $a = \ln(1 - \alpha) - \ln \|b\|_2$, $m > \sqrt{c^s \varepsilon^{-s/2}}$ (константите са зададени от (9)), и $\xi_j^{\mathcal{R}}$ е неизместената оценка на j -тата итерация на матрицата L , получена с резолвентен АМК.

В случая, когато редът на Нойман не е сходящ, сходимостта на алгоритъма Монте Карло за решаване на СЛАУ може да се осигури (или ускори) с прилагане на аналитично продължение на реда на Нойман чрез смяна на спектралния параметър λ (mapping) (вж. [19, 40, 44, 52]). Основното предимство на този

подход за ускоряване на сходимостта на един итерационен процес е несъществено влияние върху изчислителната сложност на алгоритъма. Изчислителната сложност за всеки преход се увеличава само с една аритметична операция, необходима за умножението на коефициентите $g_j, j \geq 0$, с което се осигурява сходимостта (предполага се, че тези коефициенти са предварително пресметнати с висока точност). За да се оцени изчислителната сложност на модифицирания алгоритъм, е необходимо да се оцени дисперсията на новата случайна величина:

$$\theta[h] = \frac{h_{k_0}}{\pi_{k_0}} \sum_{j=0}^{\infty} g_j W_j b_{k_j}.$$

Ще използваме следното твърдение за клас от изображения, доказано в [52]:

Твърдение 2.3.1. (Sabelfeld, [52]). *Конформното изображение $\lambda = \psi(\eta) = a_1\eta + a_2\eta^2 + \dots$ има само един прост полюс по границата на сходимост $|\eta| = 1$. Ако $Var \xi_k^{\mathcal{R}} \leq \sigma^2$ и $q = \bar{a} |\eta_*| / (1 - |\eta_*|) < 1$, тогава оценката за изчислителната сложност има следния порядък $O(|\ln \varepsilon|^4 / \varepsilon^2)$, където \bar{a} е константа, такава че $|a_i| \leq \bar{a}, i = 1, 2, \dots$, λ_* е стойността на спектралния параметър в интегралното уравнение (съответно СЛАУ) и $\eta_* = \psi^{-1}(\lambda_*)$.*

В общия случай оценка за изчислителната сложност на класа от *мрежови* АМК може да се получи, ако е известно поведението на g_j и $Var \xi_j^{\mathcal{R}}$.

Немрежови алгоритъм Монте Карло

Изчислителната сложност на разглеждания *мрежови* АМК е сравнена с изчислителната сложност на *немрежовия* алгоритъм Монте Карло. Този подход се основава на използването на локалното интегрално представяне (при предположение, че такова представяне съществува, [2, 47]) на решението на елиптична гранична задача. Съществуването на такова представяне позволява конструирането на алгоритъм Монте Карло, наречен сферичен процес (в опростения случай), за пресмятане на съответния линеен функционал. Като първа стъпка от този алгоритъм, се избира δ -околност $\partial\Omega_\delta$ на границата $\partial\Omega$ (при предположение, че решението по границата е известно), за да се осигури сходимост на конструирувания итерационен процес. За един случаен преход в траекторията е необходим следния брой операции:

- генериране на n (този брой зависи от началната плътност π) случайни числа за определяне на началната точка във веригата на Марков: $n(k_A + k_L)$ операции (k_A и k_L са аритметичните и логически операции, необходими за генериране на една случайна точка) **или** моделиране на единичен изотропен вектор, за което са необходими операции с порядък $R * n(k_A + k_L)$ (константата R зависи от ефективността на метода за моделиране и преходната плътност);
- пресмятане на координатите на началната **или** следващата точка: p_{next} (зависи от метода за моделиране и размерността d на областта $B(x)$);
- пресмятане на една стойност на функциите: $p_f; p_\pi, p_\varphi$ **or** p_k, p_P ;

- пресмятане на една реализация на случайната величина: 4 аритметични операции;
- пресмятане на разстоянието от текущата точка до границата $\partial\Omega$: γ_A аритметични и γ_L логически операции (зависи от размерността d на областта Ω);
- проверка дали текущата точка принадлежи на избраната δ -околност $\partial\Omega_\delta$ на границата на областта Ω .

За голям клас от граници на области е в сила следната оценка за средния брой преходи Ei върху сферата за една траектория [4]:

$$Ei \leq \text{const} |\ln \delta|, \quad \text{const} > 0, \quad (10)$$

където const зависи от границата $\partial\Omega$.

Ще ограничим изследването на грешката в областта $\Omega \equiv [a, b]$. За да се осигури систематична грешка ε , са необходими i прехода във веригата на Марков, където i е избрано от неравенството:

$$i > \ln^{-1} \alpha (\ln \varepsilon + \ln(1 - \alpha) - \ln F^{(0)}) - 1 \quad (\text{предполагайки } F^{(0)} > \varepsilon(1 - \alpha)),$$

където $\alpha = |\lambda| V_{B(x)} K$, $K = \max_{x,t} |k(x,t)|$ и за начално приближение е избрана дясната част $f(x)$. От друга страна е дадена оценката (10), зависеща от избраната δ -околност на границата. Следователно от тези две оценки се получава следния израз за δ в зависимост от броя на преходите i : $\delta \approx e^{i/\text{const}}$, където const зависи от границата $\partial\Omega$. Така се стига до следната теорема:

Теорема 2.3.2. *За математическото очакване на времето, необходимо за получаване на приближение с точност ε чрез разглеждания немрежови АМК, е в сила следната оценка:*

$$\begin{aligned} ET(\mathcal{GFMSA}) &> \tau [(n k_A + p_{\text{next}} + p_f + p_\pi + p_\varphi + \gamma_A + 4) l_A + \\ &+ (n k_L + \gamma_L + 1) l_L + ((R n k_A + p_{\text{next}} + p_f + p_k + p_P + 4 + \gamma_A) l_A + \\ &+ (R n k_L + \gamma_L + 1) l_L) \times \frac{\ln \varepsilon + \ln(1 - \alpha) - \ln^3 F^{(0)}}{\ln^3 \alpha} \Big] \frac{[c_\beta \sigma(\xi_j^S[h])]^2}{\varepsilon^2}. \end{aligned}$$

Могат да се формулират няколко условия за това кога *мрежовият* АМК има предимство пред *немрежовия* АМК:

- функциите, дефиниращи интегралното уравнение $(k(x,t), f(x), \varphi(x))$ имат сравнително малка максимална норма в съответната област и стойностите им могат да се пресметнат лесно (със сравнително малък брой операции);
- началната и преходната вероятност са сложни за моделиране (използва се методът на селекцията);
- размерността на областта на интегриране е голяма.

Трябва да се отбележи, че разглеждания *мрежови* АМК е приложим само за интегрални уравнения с гладки функции, но пък съществуват някои техники за преодоляване на особености от този тип (вж. [15]).

Глава 3. Алгоритми Монте Карло за приложни задачи

3.1 Симулиране на електронен транспорт в полупроводници

В трета глава са представени алгоритми Монте Карло, които са приложени при решаването и изследването на конкретни практически задачи. В първа секция е предложен един нов алгоритъм Монте Карло с намалена дисперсия за приближено решаване на уравнението на Barker-Ferry. Резултатите, представени в тази секция, са публикувани в [11, 12].

В хомогенния случай при изотропен полупроводник решението на уравнението зависи само от абсолютната стойност на импулса k и времето t (вж. [29, 33]):

$$u(k, t) = f(k) + \int_0^t dt'' \int_0^Q dk' \{k'^2 \mathcal{K}(k', k, t - t'') u(k', t'') - k'^2 \mathcal{K}(k, k', t - t'') u(k, t'')\}. \quad (11)$$

От математическа гледна точка задачата представлява пресмятане на линейен функционал от решението на уравнение (11) и дадена функция $\varphi(k, t)$ чрез метод Монте Карло, т.е.:

$$J_\varphi(u) = (\varphi, u) = \int_0^T \int_0^Q \varphi(k, t) u(k, t) dk dt. \quad (12)$$

Тъй като целта е пресмятане на решението във фиксирана точка (k_0, t_0) , функцията $\varphi(k, t)$ се задава с делта-функция: $\varphi(k, t) = \delta(k - k_0) \delta(t - t_0)$.

Въпреки че през последните години са разработени някои алгоритми МК с ограничена дисперсия (вж. [33]) за решаване на интегралната форма на квантово-кинетичното уравнение (11) (вж. [32, 33, 34, 48]), дисперсията нараства експоненциално спрямо еволюционното време: $E \Theta^2 \leq \|\phi\|^2 e^{(2Mt)^2}$. Ето защо от първостепенно значение е разработването на нови алгоритми с намалена дисперсия, с които да се получи оценка за решението при по-големи еволюционни времена.

Основната идея е разделяне на едномерната област по времето на непресичащи се подинтервали $D_i = (t_{i-1}, t_i]$, $i = 1, \dots, l$, $t_0 = 0, t_l = t$. Така началното уравнение придобива следния вид:

$$u(k, t) = f(k) + \underbrace{\int_{t_0}^{t_1} dt'' \int_0^Q dk' U(k, k', t, t'')}_{f_1(k, t)} + \dots + \underbrace{\int_{t_{l-2}}^{t_{l-1}} dt'' \int_0^Q dk' U(k, k', t, t'')}_{f_{l-1}(k, t)} + \int_{t_{l-1}}^{t_l} dt'' \int_0^Q dk' U(k, k', t, t''),$$

където

$$U(k, k', t, t'') = U_1(k, k', t, t'') u(k', t'') + U_2(k, k', t, t'') u(k, t''),$$

$$U_1(k, k', t, t'') = k'^2 \mathcal{K}(k', k, t - t''), \quad U_2(k, k', t, t'') = -k'^2 \mathcal{K}(k, k', t - t'').$$

Следователно първоначалната задача, при която по времето се интегрира в интервала $(0; t]$, се свежда до решаване на следното уравнение на Volterra-Fredholm от втори род в последния подинтервал D_l :

$$u(k, t) = F(k, t) + \int_{t_{l-1}}^t dt'' \int_0^Q dk' U(k, k', t, t''),$$

където $F(k, t) = f(k) + f_1(k, t) + \dots + f_{l-1}(k, t)$, $(k, t) \in (0, Q] \times (0, t]$.

Дясната страна $F(k, t)$ на това уравнение представлява сума от двумерни интеграли (спрямо k' и t''), дефинирани върху останалите подинтервали. Границите на тези интеграли са известни и са константи. Всеки от тези интеграли се пресмята приближено с метода на съществената извадка. Едно приближение на интеграл при фиксирана стойност на s е

$$\bar{\theta}_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \theta_i, \quad \text{където } \theta_i = \frac{U(k, \xi_i^{(k')}, t, \xi_i^{(t'')})}{p(\xi_i^{(k')}, \xi_i^{(t'')})},$$

а $\xi = (\xi^{(k')}, \xi^{(t'')})$ е случайна точка в $(0, Q] \times (t_{s-1}, t_s]$ с плътност $p(k', t'') = c |U(k, k', t, t'')|$. За приближеното пресмятане на неизвестния функционал (12) в D_l се използва следната изместена оценка от тип Монте Карло (вж. [33]), т.е.

$$\bar{\theta}_N[k_0, t_0] = \frac{1}{N} \sum_{\nu=1}^N (\theta_i[k_0, t_0])_{\nu} \xrightarrow{P} J_{\varphi}(u_i) \approx J_{\varphi}(u),$$

където

$$\theta_i[k_0, t_0] = f(k_0) + \sum_{j=1}^i W_j^{\alpha} f(k_j^{\alpha}), \quad \text{и } f(k_j^{\alpha}) = \begin{cases} f(k_j), & \text{ако } \alpha = 1, \\ f(k_{j-1}), & \text{ако } \alpha = 2. \end{cases}$$

Теглата

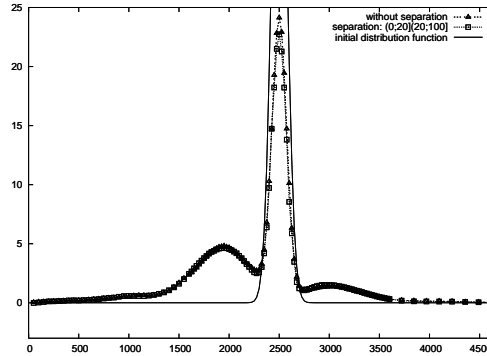
$$W_j^{\alpha} = W_{j-1}^{\alpha} \frac{U_{\alpha}(k_{j-1}, k_j, t_{j-1}, t_j)}{p_{\alpha} p(k_{j-1}, k_j, t_{j-1}, t_j)}, \quad W_0^{\alpha} = 1, \quad \alpha = 1, 2, \quad j = 1, \dots, i$$

са дефинирани върху веригата на Марков

$$(k_0, t_0) \rightarrow \dots \rightarrow (k_j, t_j) \rightarrow \dots \rightarrow (k_i, t_i), \quad j = 1, 2, \dots, i$$

и се пресмятат спрямо преходната плътност $p(k, k', t, t'')$. Условието за прекъсване на веригата е $t_i - t_{i-1} < \varepsilon$, а α обозначава избора на ядро - U_1 или U_2 .

Свойствата на представения алгоритъм (изчислителна сложност, точност) са изследвани в случая на нулево електрично поле и при крайна температура за материала галиев арсенид GaAs. Тези физични условия благоприятстват появата на квантово-механични ефекти в еволюцията на системата носители (електрони). Резултатите от сравнението на известен преди това алгоритъм МК [33] за решаване на квантово-кинетичното уравнение (11) и предложения алгоритъм



Фигура 3.1: Разпределение на енергията на електроните $k \times u(k, t)$ за $t = 100 \text{ fs}$ ($N = 10^5$). На абсцисата е нанесено $|k|^2$.

МК с разделяне на областта по времето са представени в Таблица 3.1 и Фигура 3.1. В Таблица 3.1 са използвани следните означения: ϵ - предварително зададена точност, σ - стандартно отклонение. Направени са някои предварителни пресмятания, необходими за реализацията на новия алгоритъм МК. Изчислителното време, необходимо за тяхното изпълнение, не е включено в данните от Таблица 3.1, за да има основателна база за сравнение между алгоритмите.

При анализ на резултатите от Таблица 3.1 се вижда, че за фиксиран брой реализации и несъществено увеличаване на изчислителното време с новия алгоритъм се получава четири пъти по-малка дисперсия в сравнение с алгоритъма без разделяне. На Фигура 3.1 ясно се вижда квантовия характер на решенията и нарушаването на закона за запазване на енергията - забавяне и понижаване на пиковете (локални максимуми) на кривата, описваща разпределението на енергията на електроните, в сравнение с началното разпределение. От друга страна, репликите са разширени и разширението се увеличава с отдалечаване от началния пик. Тези квантови ефекти се свързват с „паметта“ на уравнението, което не е от Марковски тип в този случай.

Резултатите от направените числени експерименти в случая на нулево електрично поле и крайна температура доказват ефекта на понижаване на дисперсията при несъществено увеличение на процесорното време.

Таблица 3.1: Сравнение на два подхода (без и с разделяне на областта по времето) за решаване на квантово-кинетично интегрално уравнение ($N = 100000$, $\epsilon = 0.0001$, $t = 100 \text{ fs}$, $T = 0^\circ\text{C}$).

метод	σ	време
ММК без разделяне	0.579135	420s
ММК с разделяне $(0, 20] \cup (20, 100]$	0.341876	425s
ММК с разделяне $(0, 50] \cup (50, 100]$	0.135119	464s

3.2 Анализ на чувствителността за модел на далечен пренос на замърсители във въздуха

Изследванията, описани във втора секция на трета глава, попадат в сферата на т.нар. екологична безопасност. Изследвана е чувствителността на концентрацията на озон във въздуха спрямо скоростните константи на избрани химични реакции в модел на далечен пренос на замърсители във въздуха. Направен е сравнителен експериментален анализ по отношение на точност и изчислителна сложност с различни методи за пресмятане на глобалните индекси на чувствителността, а също и с друг подход от типа Монте Карло - обикновен метод Монте Карло. Резултатите, представени в тази секция, са публикувани в [20, 22, 23].

Една възможна дефиниция на анализ на чувствителността според книгата на Saltelli [54] е: „Изследване как колебанието в стойностите на изходния резултат на даден модел може да се разпредели между различните източници на изменение сред входните параметри.“

Настоящите изследвания и числените експерименти са проведени с т.нар. Unified Danish Eulerian Model (UNI-DEM) [18, 65, 66, 67], като основният мотив да се избере именно този модел е, че той е един от моделите на далечен пренос на замърсители във въздуха, в които химичните процеси са описани адекватно.

Предполага се, че математическият модел може да се представи чрез моделна функция

$$u = f(x), \quad \text{където } x = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in U^d \equiv [0; 1]^d \quad (13)$$

е вектор от входни параметри със съвместна вероятностна плътност $p(x) = p(x_1, \dots, x_d)$, която е известна.

Основният индикатор за степента на влияние на даден входен параметър x_i , $i = 1, \dots, d$ върху изхода се дефинира така $\frac{D[E[u|x_i]]}{D_u}$, където $D[E[u|x_i]]$ е дисперсията на условното математическо очакване на u относно x_i и D_u е пълната дисперсия относно u . Този индикатор е наречен от Соболев *индекс на чувствителността от първи ред* [59] или *корелационно частно* според МакКау [46]. Едно съществено предимство на този метод е чрез него се пресмятат не само индексите от първи ред, но също и индекси от по-висок ред, а пълният индекс на чувствителността на даден входен параметър може да пресметне след интегриране само на една подинтегрална функция по метод Монте Карло.

Методът на Соболев за глобален анализ на чувствителността, приложен тук, се основава на т.нар. ANOVA-представяне **analysis of variance** на интегрируемата моделна функция f по единствен начин чрез събираеми с нарастваща размерност [58, 60]:

$$f(x) = f_0 + \sum_{\nu=1}^d \sum_{l_1 < \dots < l_\nu} f_{l_1 \dots l_\nu}(x_{l_1}, x_{l_2}, \dots, x_{l_\nu}), \quad \text{където } f_0 \text{ е константа,} \quad (14)$$

при следното условие за всяко от събираемите

$$\int_0^1 f_{l_1 \dots l_\nu}(x_{l_1}, x_{l_2}, \dots, x_{l_\nu}) dx_{l_k} = 0, \quad 1 \leq k \leq \nu, \quad \nu = 1, \dots, d.$$

Предположението, което стои в основата на представянето (14) е, че ключовите характеристики на моделните функции (13), описващи типични практически проблеми, могат да се представят чрез сравнително малки подмножества от входни параметри [36, 50] - константи, функции на една или две променливи.

Дефиниция 3.2.2. (Соболев [58]). *Величините*

$$D = \int_{U^d} f^2(x) dx - f_0^2, \quad D_{l_1 \dots l_\nu} = \int f_{l_1 \dots l_\nu}^2 dx_{l_1} \dots dx_{l_\nu} \quad (15)$$

се наричат дисперсии (пълна и частични дисперсии, съответно) при предположение, че $f(x)$ има сумируем квадрат.

Пълната дисперсия D на изходния параметър на модела се разлага на частичните дисперсии [58] по аналогичен начин на разлагането на моделната функция, което представлява единствено представяне от типа ANOVA:

$$D = \sum_{\nu=1}^d \sum_{l_1 < \dots < l_\nu} D_{l_1 \dots l_\nu}.$$

Като се имат предвид горните предположения за моделната функция и дисперсията на изходния параметър, следните величини

$$S_{l_1 \dots l_\nu} = \frac{D_{l_1 \dots l_\nu}}{D}, \quad \nu \in \{1, \dots, d\}$$

са наречени глобални индекси на чувствителността на Соболев [58, 60]. От дефиницията е ясно, че индексите са неотрицателни и сумата на всички индекси спрямо реда и параметрите е равна на 1. От дадените дефиниции се вижда, че от математическа гледна точка пресмятането на съответните индикатори на чувствителността се свежда до многомерно интегриране.

Тъй като пресмятането на интегралите, зададени чрез формулите (15), изисква интегриране на различни 2^d подинтегрални функции, което не е ефективно от изчислителна гледна точка, Соболев е предложил изчислителна процедура [60], основаваща се на следното представяне на дисперсията D_y : $D_y = \int f(x) f(y, z') dx dz' - f_0^2$, където $x = (y, z)$. Последното равенство позволява да се конструира алгоритъм Монте Карло за пресмятане на f_0 , D и D_y , където $\xi = (\eta, \zeta)$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) &\xrightarrow{P} f_0, & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) f(\eta_j, \zeta'_j) &\xrightarrow{P} D_y + f_0^2, \\ \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f^2(\xi_j) &\xrightarrow{P} D + f_0^2, & \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(\xi_j) f(\eta'_j, \zeta_j) &\xrightarrow{P} D_z + f_0^2. \end{aligned}$$

Изчислителната сложност за пресмятането на всички индекси от първи ред и всички пълни индекси чрез описания подход на Соболев се определя от $N(2d+1)$ на брой стойности на моделната (N стойности на функцията за f_0 , dN стойности на функцията за индексите от първи ред, и dN стойности на функцията за пълните индекси), където N е размерността на извадката, а d е броят на входните параметри [35, 53].

Тъй като в случая на малки (по стойност) индекси на чувствителността (т.е. $D_y \ll f_0^2$), описаният стандартен алгоритъм Монте Карло [58] за пресмятане на глобалните индекси на чувствителността се оказва неефективен, поради загуба на точност, в настоящото изследване е приложена една негова модификация - т.нар. комбиниран подход. Чрез сравнителен експериментален анализ е установено, че именно тази модификация преодолява споменатия недостатък на стандартния алгоритъм, което потвърждава и теоретичната оценка за вероятностната грешка [61]. Идеята на комбинирания подход се състои в замяната на оригиналната подинтегрална функция (функцията, чрез която е зададен математическият модел) с функция от следния тип $\varphi(x) = f(x) - c$, където $c \sim f_0$. За числените експерименти за константата c е избрана оценка на f_0 , получена с обикновен метод Монте Карло. За дисперсиите е предложена следната оценка:

$$D_y = \int \varphi(x) [\varphi(y, z') dx dz' - \varphi(x')] dx dx', \quad D = \int \varphi(x) [\varphi(x) - \varphi(x')] dx dx'.$$

В Секции **3.2.6** и **3.2.7** са представени и анализирани резултатите от числените експерименти с конкретен модел на далечен пренос на замърсители във въздуха - UNI-DEM, който симулира преноса на замърсители във въздуха. В резултат на пресмятанятията с модела се получават таблици със стойности на моделната функция. Тези стойности представляват отношения между стойностите на концентрацията на съответния замърсител за фиксирано множество от стойности на пертурбационните параметри $\alpha_i \in \{0.1, \dots, 2.0\}$, пресметнати в точката, в която е достигнат осреднения максимум на концентрацията, и този осреднен максимум за $\alpha = (1, \dots, 1)$. В конкретния случай скоростните константи на химичните реакции (по-точно, нормирани спрямо максималната осреднена стойност на концентрацията на съответния замърсител) се разглеждат като входни параметри, а концентрациите на замърсителите - като изходни параметри. Тъй като прилагането на описаната по-горе техника за анализ на чувствителността предполага моделът да е зададен с функция от типа (13), *първата стъпка* е използване на апроксимационен апарат, за да се генерира аналитично зададена непрекъсната функция, а *втората стъпка* е пресмятане на глобалните индекси на чувствителността на Соболев чрез описания комбиниран подход.

Три химични реакции са избрани според влиянието им върху разпределението на концентрациите на озон при предварителни експерименти с опростен модел [66]. Следователно областта на интегриране е куб: $\Omega = [0.6; 1.4]^3$. В действителност, установено е експериментално, че скоростната константа се изменя като нормално разпределена случайна величина с математическо очакване 1.0.

Таблица 3.7: Индекси от първи ред и пълни индекси на чувствителността на входните параметри, получени чрез комбинирания подход, прилагайки обикновен и адаптивен алгоритъм Монте Карло за численото интегриране.

Велич.	Обикновен МК			Адаптивен МК				
	N	Оценка	Отн. гр.	$\#_{sub}$	N_{sub}	ε	Оценка	Отн. гр.
g_0	192	0.2516	0.0038	-	-	-	-	-
	7200	0.2524	0.0005	-	-	-	-	-
	32000	0.2524	0.0005	-	-	-	-	-
D	192	0.0055	0.0493	64	3	0.5	0.0056	0.0725
	7200	0.0052	0.0130	180	40	0.0165	0.0051	0.0333
	32000	0.0052	0.0034	64	500	0.1	0.0052	0.0003
S_1	192	0.6502	0.2214	64	3	0.5	0.5072	0.0473
	7200	0.5299	0.0046	180	40	0.0165	0.5307	0.0031
	32000	0.5326	0.0004	64	500	0.1	0.5323	0.0001
S_3	192	0.0055	1.7695	64	3	0.5	0.0016	0.1790
	7200	0.0009	0.5367	180	40	0.0165	0.0027	0.3463
	32000	0.0013	0.3250	64	500	0.1	0.0019	0.0581
$S_{x_1}^{tot}$	192	0.5875	0.0923	64	3	0.5	0.5108	0.0503
	7200	0.5346	0.0061	180	40	0.0165	0.5345	0.0061
	32000	0.5368	0.0020	64	500	0.1	0.5376	0.0004
$S_{x_3}^{tot}$	192	0.0004	1.1693	64	3	0.5	0.0047	1.1013
	7200	0.0006	0.7529	180	40	0.0165	0.0021	0.0895
	32000	0.0018	0.2094	64	500	0.1	0.0022	0.0153

Законът за съхранение на масата на веществата при химични реакции може да бъде нарушен за по-големи интервали.

Част от резултатите от числените експерименти са представени в Таблица 3.7, като са използвани следните означения: g_0 е стойността на интеграла върху подинтегрална функция $g(x)$; c е константа, получена като оценка на f_0 с обикновен метод Монте Карло. Дадено е сравнение между съответните индекси, получени по комбинирания подход, прилагайки обикновен и адаптивен алгоритъм Монте Карло за численото интегриране. Използвани са полиноми от 4-та (35 неизвестни коефициенти) степен за приближаване на данните. Адаптивният алгоритъм отбелязва предимство пред обикновения алгоритъм при фиксиран брой реализации, което потвърждава ефекта на намаляване на дисперсията, характерен за приложената адаптивна техника. Освен това, приближените стойности на величините са достатъчно близки до точните стойности, дори и за най-малкия избран брой реализации. Вижда се, че влиянието на първия параметър (съответна скоростна константа) е съществено, а на третия - незначително.

Определяйки основните химични реакции, влияещи върху поведението на системата, специалистите от различни приложни области (физика, химия) ще могат да получат ценна информация, която ще бъде приложена за идентифициране на параметрите, които трябва да бъдат изследвани по-точно, защото

резултатите от модела са много чувствителни по отношение на тяхното изменение. Това, от своя страна, ще доведе и до повишаване на надеждността на прогнозите, изготвени в следствие на резултатите от модела.

Авторска справка

Основните научни приноси на настоящата дисертация са:

1. Разработен е адаптивен алгоритъм Монте Карло за многомерно числено интегриране. Алгоритъмът има предимство пред обикновения алгоритъм Монте Карло по отношение на оценената относителна грешка при фиксиран брой реализации на съответната случайна величина.
2. Изследван е метод на разделяне по важност за решаване на интегрални уравнения, основан на метод на разделяне по важност за пресмятане на интеграли. Проучени са условията за прилагане на метода и е направен анализ на грешката.
3. Изследван е клас от мрежови алгоритми Монте Карло за решаване на интегрални уравнения на Fredholm от втори род при предположение, че съответният ред на Neumann за итерационната матрица на получената след апроксимация система от линейни алгебрични уравнения не е сходящ или е бавно сходящ. Приложена е специфична техника за ускоряване на сходимостта - аналитично продължение на реда чрез смяна на спектралния параметър. Предимството на тази техника е несъщественото влияние върху изчислителната сложност.
4. Получена е оценка на изчислителната сложност на мрежови алгоритъм Монте Карло за клас от интегрални уравнения, която е сравнена със съответната оценка на немрежови алгоритъм Монте Карло. Проучени са условията, при които класът от мрежови алгоритми Монте Карло е по-ефективен.

Основните научно-приложни приноси на настоящата дисертация са:

1. Разработен е нов алгоритъм Монте Карло с намалена дисперсия за решаване на уравнението на Barker-Ferry, което се използва като квантово-кинетичен модел на електронно-фононно взаимодействие в хомогенен полупроводник.
2. Разработена е систематизирана процедура за провеждане на анализ на чувствителността за голям математически модел, описващ пренос на замърсители във въздуха, като повечето от резултатите могат да бъдат приложени и към други големи математически модели.

Благодарности

Изказвам своята искрена признателност и благодарност на научния си ръководител ст.н.с. I ст. дн Иван Димов за неговите ценни напътствия, професионална компетентност и съдействие при провеждане на настоящите изследвания и при подготовката на дисертацията. Изключително благодаря и за неговата неограничена морална подкрепа и за проявеното търпение.

Благодаря на колегите проф. д-р Захари Златев, ст.н.с. II ст. д-р Цветан Остромски и н.с. I ст. д-р София Ивановска за оказаното съдействие при провеждане на някои от числените експерименти. Благодаря на всички колеги от секции „Паралелни алгоритми“, „Грид технологии и приложения“ и „Научни пресмятания“ в ИПОИ-БАН за полезните дискусии, предоставянето на интересни задачи и готовността им за съдействие във всеки момент. Благодаря на колегите от Centre for Advanced Computing and Emerging Technologies (ACET), Университет на Рединг, за проявената отзивчивост и полезните дискусии по време на посещенията ми там.

Благодаря специално на семейството и приятелите си за тяхната подкрепа, търпение и стимулиращи напътствия.

Благодаря за финансовата подкрепа по проектите: BIS-21++, NATO PDD(TC)-ESP.EAP.CLG 982641, договори с Национален Фонд „Научни изследвания“ #DO02-215/2008, #DO02-146/2008, #DO02-115/2008.

Литература

- [1] Б. Боянов. *Лекции по числени методи*. Дарба, София, 1998.
- [2] С. Владимиров. *Уравнения математической физики*. Наука, Москва, 1976.
- [3] Б. Димитров. *Вериги на Марков*. Наука и изкуство, София, 1974.
- [4] С. Ермаков и Г. Михайлов. *Статистическое моделирование*. Наука, Москва, 1982.
- [5] А. Женсыкбаев. О наилучших квадратурных формулах для некоторых классов неперiodических функций. In *Докл. АН СССР*, volume 236, pages 531–534, 1977.
- [6] А. Женсыкбаев. Характеристические свойства наилучших квадратурных формул. *Сиб. мат. журн.*, 20:49–68, 1979.
- [7] С. Никольский. *Квадратурные формулы*. Наука, Москва, 1988.
- [8] И. Соболев. *Численные методы Монте Карло*. Наука, Москва, 1973.
- [9] Н. Янев и Б. Димитров. *Вероятности и статистика*. Наука и изкуство, София, 1990.
- [10] E. Atanassov and I.T. Dimov. A New Optimal Monte Carlo Method for Calculating Integrals of Smooth Functions. *Journal of Monte Carlo Methods and Applications*, 5(2):149–167, 1999.

- [11] E. Atanassov, R. Georgieva, T. Gurov, S. Ivanovska, A. Karaivanova, and M. Nedjalkov. New Algorithms in the Grid Application SALUTE. In *Proceeding of the 30th International Convention MIPRO 2007*, volume 4487, pages 217–222, Rijeka, Croatia, 2007. Studio Hofbauer.
- [12] E. Atanassov, T. Gurov, A. Karaivanova, M. Nedjalkov, S. Ivanovska, and R. Georgieva. SALUTE – Grid application for Quantum Transport. In *BGSIAM proceeding of the 2nd Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM*, volume 5910, pages C-23–C-25, 2008.
- [13] N. Bahvalov. On the Approximate Computation of Multiple Integrals. In *Vestnik Moscow State University, Ser. Mat., Mech.*, volume 4, pages 3–18, 1959.
- [14] N. Bahvalov. Average Estimation of the Remainder Term of Quadrature Formulas. *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, 1(1):64–77, 1961.
- [15] N. Bahvalov, N. Zhidkov, and G. Kobelkov. *Numerical Methods*. Nauka, 1987.
- [16] J.H. Curtiss. Monte Carlo Methods for The Iteration of Linear Operators. *J. Math. Phys.*, 32:209–232, 1954.
- [17] I.T. Dimov. Efficient and Overconvergent Monte Carlo Methods. Parallel algorithms. In I.T. Dimov and O. Tonev, editors, *Advances in Parallel Algorithms*, pages 100–111, Amsterdam, 1994. IOS Press.
- [18] I.T. Dimov. *Monte Carlo Methods for Applied Scientists*. World Scientific, Singapore, 2008.
- [19] I.T. Dimov, V. Alexandrov, and A. Karaivanova. Parallel Resolvent Monte Carlo Algorithms for Linear Algebra Problems. *Mathematics and Computers in Simulation*, 55:25–35, 2001.
- [20] I.T. Dimov and R. Georgieva. Monte Carlo Adaptive Technique for Sensitivity Analysis of a Large-scale Air Pollution Model. In *LNCS*, volume 5910. Springer-Verlag. (accepted).
- [21] I.T. Dimov and R. Georgieva. Complexity of Monte Carlo Algorithms for a Class of Integral Equations. In *LNCS, Part I*, volume 4487, pages 731–738. Springer-Verlag, 2007.
- [22] I.T. Dimov and R. Georgieva. Monte Carlo Algorithms for Evaluating Sobol’ Sensitivity Indices. *Math. Comput. Simul.*, 2009.
- [23] I.T. Dimov, R. Georgieva, S. Ivanovska, Tz. Ostromsky, and Z. Zlatev. Sensitivity Analysis of Air Pollution Models. In *BGSIAM proceeding of the 3rd Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM*, pages 28–31, 2009.
- [24] I.T. Dimov and O. Tonev. Monte Carlo Numerical Methods With Overconvergent Probable Error. In *Proc. 2nd Intern. Conf. on Numerical Methods and Appl.*, pages 116–120, Sofia, 1989. Publ. house of the Bulg. Acad. Sci.
- [25] I.T. Dimov and O. Tonev. Monte Carlo Algorithms: Performance Analysis for Some Computer Architectures. *J. of Computational and Applied Mathematics*, 48:253–277, 1993.
- [26] V. Dupach. Stochasticke Pocetni Metody. *Cas. pro pest. mat.*, 81(1):55–68, 1956.

- [27] H. Engels. *Numerical Quadrature and Cubature*. Academic Press, London, New York, 1980.
- [28] S. M. Ermakov. *Monte Carlo Method and Related Questions*. Nauka, Moscow, 1971.
- [29] T. Gurov et al. Femtosecond Relaxation of Hot Electrons by Phonon Emission in Presence of Electric Field. *Physica B*, 314(1):301–304, 2002.
- [30] H. Faure. Monte-Carlo and Quasi-Monte-Carlo Methods for Numerical Integration. *Combinatorial and computational mathematics*, pages 1–12, 2001.
- [31] A. Genz. Testing Multidimensional Integration Routines. In *Proc. of international conference on Tools, methods and languages for scientific and engineering computation*, pages 81–94, New York, USA, 1984. Elsevier North-Holland.
- [32] T. Gurov, M. Nedjalkov, and I.T. Dimov. A Monte Carlo Branch Method for Simulation of Nonlinear Electron Quantum-kinetics in One-band Semiconductor. In O. Iliev, M. Kaschiev, Bl. Sendov, and P.S. Vassilevski, editors, *Proceedings of NMA'98 on the Recent Advances in Numerical Methods and Applications*, volume 2, pages 257–265, Singapore, 1999. World Scientific.
- [33] T. Gurov and P. Whitlock. An Efficient Backward Monte Carlo Estimator for Solving of a Quantum Kinetic Equation with Memory Kernel. *Mathematics and Computers in Simulation*, 60:85–105, 2002.
- [34] T. Gurov, P. Whitlock, and I.T. Dimov. Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Algorithms for the Barker-Ferry Equation with Low Complexity. In *LNCS*, volume 2542, pages 108–116, 2003.
- [35] T. Homma and A. Saltelli. Importance Measures in Global Sensitivity Analysis of Nonlinear Models. *Reliability Engineering and System Safety*, 52:1–17, 1996.
- [36] J. Jacques, C. Lavergne, and N. Devictor. Sensitivity Analysis in Presence of Model Uncertainty and Correlated Inputs. *Reliability Engineering and System Safety*, 91:1126–1134, 2006.
- [37] H. Kahn. Random Sampling (Monte Carlo) techniques in Neutron Attenuation Problems. *Nucleonics*, 6:27–33, 60–65, 1950.
- [38] M. Kalos. Monte Carlo Method for Estimation of Flux at a Point. *Nuclear Sci. Engng.*, 16(1):111–117, 1963.
- [39] L. Kantorovich and G. Akilov. *Functional Analysis*. Nauka, Moskow, 1977.
- [40] L. Kantorovich and G. Akilov. *Functional Aanalysis in Normed Spaces*. Pergamon Press, Oxford, 1982.
- [41] L. V. Kantorovich and V. I. Krylov. *Approximate Methods of Higher Analysis*. Physical and Mathematical State Publishing House, Leningrad, 1962.
- [42] A. Karaivanova. Adaptive Monte Carlo Methods for Numerical Integration. *Mathematica Balkanica*, 11:391–406, 1997.
- [43] A. Karaivanova and I.T. Dimov. Error Analysis of an Adaptive Monte Carlo Method for Numerical Integration. *Mathematics and Computers in Simulation*, 47:201–213, 1998.

- [44] V. Kublanovskaya. Application of Analytical Continuation by Substitution of Variables in Numerical Analysis. In *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, volume 53, pages 145–185. 1959.
- [45] M. Matsumoto and T. Nishimura. Mersenne Twister: a 623-Dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-Random Number Generator. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8(1):3–30, 1998.
- [46] M. McKay. Evaluating Prediction Uncertainty. Technical report, US Nuclear Regulatory Commission and Los Alamos National Laboratory, 1995.
- [47] C. Miranda. *Partial Differential Equations of Elliptic Type*. Springer-Verlag, Berlin, 1970.
- [48] M. Nedjalkov, I.T. Dimov, F. Rossi, and C. Jacoboni. Convergency of the Monte Carlo Algorithms for the Solution of the Wigner Quantum-transport Equation. *Journal of Mathematical and Computer Modeling*, 23(8/9):159–166, 1996.
- [49] E. Novak and K. Ritter. High Dimensional Integration of Smooth Functions Over Cubes. *Numerische Mathematik*, pages 1–19, 1996.
- [50] H. Rabitz and O. Alis. *Managing the Tyranny of Parameters in Mathematical Modelling*, pages 199–223. John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- [51] K. Sabelfeld. Methods of Numerical Construction of the Resolvent When Solving Integral And Differential Equations by the Monte Carlo Method. In *Theory and applications of the statistical simulation*, pages 1–10. Computing Center, Novosibirsk, 1985.
- [52] K. Sabelfeld. *Monte Carlo Methods in Boundary Value Problems*. Springer Series in Computational Physics. Springer-Verlag, 1991.
- [53] A. Saltelli. Making Best Use of Model Valuations to Compute Sensitivity Indices. *Computer Physics Communications*, 145:280–297, 2002.
- [54] A. Saltelli, S. Tarantola, F. Campolongo, and M. Ratto. *Sensitivity Analysis in Practice: a Guide to Assessing Scientific Models*. Halsted Press, New York, 2004.
- [55] Bl. Sendov, A. Andreev, and N. Kjurkchiev. *Numerical Solution of Polynomial Equations (Handbook of Numerical Analysis), Solution of Equations in \mathbf{R}^n (Part 2)*. North-Holland, Amsterdam, New York, 1994.
- [56] M. Snir, S. Otto, S. Huss-Lederman, D. Walker, and J. Dongarra. *MPI: the Complete Reference*. MIT Press Cambridge, Massachusetts, USA, 1995.
- [57] I.M. Sobol'. On Quadratic Formulas for Functions of Several Variables Satisfying a General Lipschitz Condition. *USSR Comput. Math. and math. Phys.*, 29(6):936–941, 1989.
- [58] I.M. Sobol'. Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models. *Matem. Modelirovanie*, 2(1):112–118, 1990.
- [59] I.M. Sobol'. Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models. *Mathematical Modeling and Computational Experiment*, 1:407–414, 1993.

- [60] I.M. Sobol'. Global Sensitivity Indices for Nonlinear Mathematical Models And Their Monte Carlo Estimates. *Mathematics and Computers in Simulation*, 55(1-3):271–280, 2001.
- [61] I.M. Sobol' and E. Myshetskaya. Monte Carlo Estimators for Small Sensitivity Indices. *Monte Carlo Methods and Applications*, 13(5-6):455–465, 2007.
- [62] M. Takev. On Probable Error of the Monte Carlo Method for Numerical Integration. *Mathematica Balkanica (New Series)*, 6:231–235, 1992.
- [63] H. Tanaka and H. Nagata. Quasi-random Number Method for the Numerical Integration. *Supplement of the progress of theoretical physics*, 56:121–131, 1974.
- [64] A. Törni. Crude Monte Carlo-quadrature in Infinite Variance Case and the Central Limit Theorem. *Nordisk. Tidskr. Inform. Behandl.*, 6(4):339–346, 1966.
- [65] Z. Zlatev. *Computer Treatment of Large Air Pollution Models*. KLUWER Academic Publishers, Dordrecht-Boston-London, 1995.
- [66] Z. Zlatev and I.T. Dimov. *Computational and Numerical Challenges in Environmental Modelling*. Elsevier, Amsterdam, 2006.
- [67] Z. Zlatev, I.T. Dimov, and K. Georgiev. Three-dimensional Version of the Danish Eulerian Model. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 76(S4):473–476, 1996.
- [68] <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>.
- [69] <http://www.wolfram.com/products/mathematica/index.html/>.
- [70] <http://www.mathworks.com/>.
- [71] <http://www.mipro.hr/>.
- [72] <http://sprng.cs.fsu.edu/>.
- [73] Mersenne Twister pseudorandom number generator: <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/emt.html>.