

**КОМПЮТЪРНО И МАТЕМАТИЧЕСКО МОДЕЛИРАНЕ
В НАЦИОНАЛНАТА НАУЧНА ПРОГРАМА
„ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ
ТЕХНОЛОГИИ ЗА ЕДИНЕН ЦИФРОВ ПАЗАР
В НАУКАТА, ОБРАЗОВАНИЕТО И СИГУРНОСТТА“***

**Нели Димитрова, Петър Бойваленков, Петя Динева,
Цвятко Рангелов, Петър Рашков, Венелин Тодоров**

Представено е кратко описание на Националната научна програма „Информационни и комуникационни технологии за единен цифров пазар в науката, образованието и сигурността“, финансирана от Министерство на образованието и науката. По-специално внимание е отделено на постигнатите резултати в изпълнението на Научна задача 1.2.3, посветена на разработване на нови математически методи и изчислителни техники за изследване и валидиране на динамични модели с разнообразни приложения. Предложени са авторски резултати по три от разработваните тематики в научната задача.

1. Описание на Програмата. Националната научна програма “Информационни и комуникационни технологии за единен цифров пазар в науката, образованието и сигурността“ (ИКТвНОС) е утвърдена с Постановление № 203 на МС от 2018 г. и се финансира от Министерство на образованието и науката съгласно договор ДО1–205/23.11.2018 г. Програмата е създадена в изпълнение на Националната стратегия за развитие на научните изследвания 2017–2030 чрез:

- разширяване на участието на българската научна общност в европейското научноизследователско пространство и на международното научно сътрудничество;
- значително интензифициране на връзките на науката с образованието, бизнеса, държавните органи и обществото;
- избягване на фрагментацията в българската наука чрез насърчаване на интеграцията и взаимодействието между различните публични научноизследователски институти, за да се изгради критична маса и да се избегне припокриване и дублиране на ресурси.

* Настоящата разработка е осъществена с подкрепата на Националната научна програма “Информационни и комуникационни технологии за единен цифров пазар в науката, образованието и сигурността“, договор ДО1–205/23.11.2018 г., финансирана от Министерство на образованието и науката.

Ключови думи: математическо моделиране, компютърно моделиране, изчислителна наномеханика, епидемиологичен модел, екологичен модел.

Конкретните цели на програмата са:

- осигуряване на отворен достъп до електронна инфраструктура на екипи от учени и докторанти от различни научни дисциплини;
- оказване на компетентна подкрепа за научни приложения в ключови области като медицина и биоинформатика, екология и биоразнообразие, нови материали, транспорт, енергийна ефективност, хуманитарни и социални науки и др.;
- формиране на интердисциплинарни екипи, използващи най-съвременни постижения в информационните технологии;
- моделиране на процеси и явления с обработка на големи обеми от данни и разработване на сложни математически и компютърни модели;
- разширяване на участието на български научни екипи в европейски проекти и научноизследователски програми.

Дейностите по Националната научна програма ИКТвНОС са групирани в три основни направления (компоненти).

Компонент 1. Цифрови технологии в обучението, преподаването, работата с млади таланти и специални целеви групи. Основният акцент тук е върху високопроизводителните и разпределени пресмятания. Предвижда се интегриране на съвременните изчислителни системи и системи за съхранение на данни, софтуер,¹ мидълуер¹ и услуги с цел разработване и експлоатация на изчислително интензивни научни приложения. Друг акцент от предвидените дейности е върху компютърно и математическо моделиране с приложение в инженерните и природните науки. В програмата е заложено:

- разработване на *in silico*² методи и инструменти за изследване на комплексни среди в контекста на иновативни технологични решения;
- моделиране и оптимизация на моно- и биметални наноматериали с желани свойства, както и нови по-ефективни материали за наноелектрониката, системите за съхранение и преобразуване на енергия;
- разработване на нови математически методи и изчислителни техники за изследване и валидиране на динамични модели, описани чрез диференциални и диференчни уравнения с приложение, модели за анализ на данни и откриване на закономерности от данни при оценка и предсказване на безопасността или токсичността на лекарства;
- предвиждане и гарантиране на качеството в човеко-кибер-физически системи;
- разработване и приложение на математически модели и числени методи за анализ на термални транспортни явления в микро-електро-механични системи;
- конструиране, класификация и анализ на комбинаторни структури;
- моделиране и управление на биомехатронни устройства и системи;
- разработване на софтуерни инструменти, системи и модели за проектиране на мултиплатформена операторска станция.

В това направление се очаква и създаването на хранилища за отворени научни резултати с цел въвеждане в България на идеите, практиките и политиките на Европейския съюз, свързани с отворената наука и присъединяване на страната ни към

¹Мидълуер (англ. Middleware) – широка категория от софтуерни продукти, чрез които се осигурява инфраструктура за приложения (бел. ред.).

²*In silico* е новоизкован термин (1987) от английските думи *in* и *silicon* по подобие на латинските *in vivo*, *in vitro* и *in situ*. Отнася се за експерименти, извършвани в компютърна среда (бел. ред.).

Европейския облак за отворена наука (European Open Science Cloud). Приоритет за програмата са и съхранението и анализът на големи обеми от данни, създаване на технологии за приложение на изкуствен интелект, развитие на център за Grid и „облачни“ технологии.

Компонент 2. Информационна сигурност. Ключов аспект е създаването и технологичното осигуряване на отворени образователни ресурси. Това включва създаване на онлайн образователни курсове за свободно ползване и осигуряване на необходимото дисково пространство и услуги. Друг аспект е разработването на езикови технологии и технологии, базирани на съдържание за по-добро образование, включително развитието и интегрирането им в учебното съдържание. Не на последно място програмата предвижда разработване на съвременни средства за цифровизация в образованието и работата с млади таланти чрез добавена виртуална реалност в обучението, примерни модели за онагледяване на учебното съдържание и разпространение на разработените иновативни приложения.

Компонент 3. Електронна инфраструктура за отворена наука и отворен достъп до научни резултати. В дейностите по това направление е заложен актуален анализ на десетте най-опасни заплахи за информационната сигурност с профилиране към отворени данни. Предвижда се:

- разработка на политики по информационна сигурност и предоставяне на консултации по проблемите на киберсигурността на университети, научни институти, училища, държавна администрация;
- обучение и образование по информационна сигурност на ученици, студенти, граждани и администрация;
- разработване и одитиране на сигурен софтуер чрез анализиране на наличните препоръки за неговото създаване, допълването им и предоставяне на консултации в това направление на заинтересовани институции.

Партньори по програмата са Софийският университет „Св. Климент Охридски“, Техническият университет – София, Българската академия на науките, Университетът „Проф. д-р Асен Златаров“ – Бургас, Пловдивският университет „Паисий Хилендарски“, Химикотехнологичният и металургичен университет, Русенският университет „Ангел Кънчев“, Шуменският университет „Еп. Константин Преславски“, Медицинският университет – София, Техническият университет – Варна, Университетът по библиотекознание и информационни технологии, Югозападният университет „Неофит Рилски“.

Повече и по-подробна информация за Националната програма ИКТвНОС може да се намери на <https://npict.bg>.

2. Описание на Научна задача 1.2.3. Институтът по математика и информатика при Българската академия на науките е партньор в изпълнението на 11 научни задачи в първите две основни направления на проекта. Една от тези задачи е включена в Компонент 1 „Електронна инфраструктура за отворена наука и отворен достъп до научни резултати“, Работен пакет 1.2 „Компютърно и математическо моделиране с приложение в инженерните и природните науки“ и е озаглавена

Разработване на нови математически методи и изчислителни техники за изследване и валидиране на динамични модели, описани чрез обикновени и/или частни диференциални уравнения с приложение (Научна задача 1.2.3.)

Научните и научноприложните изследвания са ориентирани към две основни теми:

Тема 1: Разработване и изследване на математически модели с приложения в екологията, биотехнологиите, биомедицината, инженерните и другите науки

Тема 2: Разработване на нови високоефективни числени алгоритми на базата на апроксимационни техники и нови математически методи за решаване на задачи в условия на неопределеност

Двете теми са тясно свързани и трудно разграничими поради интердисциплинарния характер на научната задача. Известно е, че математическото моделиране е интердисциплинарна област, която изисква задълбочени математически познания в разнообразни тематични области, знания в приложната област на моделираното явление, създаване и използване на подходящи изчислителни техники за компютърно моделиране и симулации в съвременни софтуерни среди. Всяка практическа задача (модел) предлага редица предизвикателства пред изследователя, тъй като добре известните класически теории невинаги са достатъчни за установяване на искания резултат, а се налага разработването на нови теории, нови изчислителни алгоритми и компютърни техники за визуализация.

Изследователският колектив по тази задача е съставен от утвърдени и млади учени и докторанти от Института по математика и информатика и Института по механика на БАН, и от Шуменския университет „Еп. Константин Преславски“.

По-долу е направен кратък преглед на постигнатите резултати по Научна задача 1.2.3. през първите две години от изпълнението на програмата.

Тема 1. Разработване и изследване на математически модели с приложения в екологията, биотехнологиите, биомедицината, инженерните и другите науки

- Предложен е общ подход за стабилизиране на динамиката на двумерен нелинеен модел на хемостат (биореактор), описващ анаеробно разграждане на органични отпадъци (субстрат) в замърсени индустриални и градски води. Целта е решенията на модела за крайно време да достигнат зададено множество във фазовата равнина, такова че стойностите на субстратната концентрация да попаднат в определени граници (интервал). Тези граници по правило се определят от екологични норми. Стабилизируемостта на динамиката е постигната чрез ограничено управление (bounded open-loop control), което е ориентирано към практически приложения, например при стабилизация на динамиката чрез обратна връзка с дискретно закъснение във времето.
- Предложен е математически модел на биореактор за биологично разграждане в отпадни води на смес от химически замърсители фенол и *p*-крезол. Иновативната идея в съставянето на модела е въвеждането на т. нар. SKIP (Sum Kinetics with Interaction Parameters) моделна функция, описваща специфичната скорост на растеж на биомасата в реактора. Доказано е съществуване, единственост и ограниченост на неотрицателни решения на системата. Намерени са равновесните точки на модела, изследвана е тяхната асимптотична устойчивост и бифуркации относно управляващия параметър (т. нар. скорост на разреждане в биореактора). Представени са числови симулации, които илюстрират и в някои случаи допълват теоретичните изследвания.
- За непрекъснат процес на метанова ферментация с производство на биогаз е предложен моделно-базиран метод за управление в режим на плъзгане (би-

нарно управление). Предложеното управление изисква онлайн измерване само на две променливи – концентрацията на органичните замърсители и скоростта на производство на биогаз. Моделът на управлението е разработен по отношение на спомагателна входна променлива, за да се получи гладък сигнал на скоростта на разреждане, който е необходим в процесите на ферментация. Променливите на състоянието, външното смущение, изходът на процеса и управляващият вход се променят в зададени интервали. Добрата робастност³ на затворената система при различни смущения е демонстрирана чрез симулационни изследвания в MATLAB с помощта на Simulink.

- Предложен е иновативен алгебричен интервален модел на линейни уравнения на равновесие, които са в основата на крайно-елементни модели за анализ и дизайн на строителни конструкции с интервални моделни параметри. Разработена е обща методология, доставяща граници за изменчивостта на вторични неизвестни като деформации, вътрешни сили и напрежения в елементите. Методологията е илюстрирана върху статични еластични модели на пръчкови конструкции. Тя е ефективна по отношение на точност, изчислителна сложност и е приложима към модели с голяма размерност.
- Изследван е модел на Каро, описващ осцилиращ неньютонов флуид в безкраен канал. В модела напречната компонента на скоростта се описва с равномерно параболично нелинейно уравнение. Решението се представя в безкраен ред за малки стойности на числата на Каро. С помощта на специално конструирани бариерни функции са доказани априорни оценки за решението и неговия градиент, зависещи от параметрите на задачата. Разглежданата задача се появява при изследване на различни физиологични, химични и биохимични процеси, като например кръвен или полимерен флуид.
- Разработен е подход за обработване на експерименталните данни, при който: (i) се избират класове от функции (един или няколко), в които по метода на най-малките квадрати (или друг метод) се определят *най-добрите* функции, приближаващи експерименталните данни; (ii) по някой от критериите за оптималност на модели (Akaike Information Criterion (AIC), Bayesian Information Criterion (BIC), Hausdorff Distance Criterion (HDC) и др.) се определя оптималният модел измежду най-добрите функции. Проведени са експерименти за пресмятане на зависимостите *торг-вгъл* и *торг-скорост* за различни мускулни групи.
- Представена е схема BOOST за скриване на пациентски данни в медицински изображения, при което е използвана математическа система за ядрени завъртания.
- Предложени са нови подходи за локализиране на повредите на греди в строителни конструкции. Подходите се основават на сравнение на времевите реакции на непокътнати и повредени греди. Разглеждат се два вида повреди: а) дефекти, моделирани като намалена дебелина на гредата в определен участък, и б) дефекти, моделирани с намалена коравина на гредата в определен участък.

³Робастност (англ. robustness) – устойчивост на затворената система при параметрична неопределеност (бел.ред.).

- Предложен е нов разширен модел, описващ движението на субстанция в канал, съдържащ мрежа от краен брой възли. Новият разширен модел съдържа известни подобни модели като частни случаи. Разширеният модел е приложен при изследване на потоци в мрежи като например движение на ресурси, транспортен трафик, движение на мигранти и др.

Тема 2. Разработване на нови високоефективни числени алгоритми и математически методи

- Получени са нови неравенства от тип Харди: (i) с двойно сингулярни тегла (във вътрешна точка и върху границата на областта), (ii) в сектор и чрез граничен преход – във външността на кълбото.
- Получена е аналитична оценка отдолу на първото собствено число λ на p -Лапласиана с условия на Дирихле в ограничена област на n -мерното пространство чрез неравенство на Харди с двойно сингулярно ядро.
- Изучава се фундаменталното решение на многомерното уравнение на дифузия, съдържащо дробни производни по времето и пространството. За тази цел се прилага принципът за субординация, който дава връзката на изучаваното фундаментално решение с класическата Гаусова функция. Резултатите са приложими при модели, описващи аномални дифузионни процеси в комплексни среди (порести, хетерогенни, аморфни) като колоиди, диелектрици, биологични системи, полимери и др.
- Изследвана е задачата на Коши за еволюционно уравнение, съдържащо оператори от дробен ред по времето и по пространството: дробна производна на Капуто от ред β по времето и оператор $-A\alpha$ по пространството, където $-A$ генерира силно непрекъснатата еднопараметрична полугрупа в Банахово пространство.
- Изследвани са решенията на линейни кооперативни, слабо-свързани системи елиптични уравнения. Доказан е строг вътрешен и граничен принцип за максимума на решенията. Този резултат намира приложение при изследване на системи от тип реакция-дифузия, описващи ензимен сензор на концентрацията на фенол в химичната индустрия.
- Доказани са нови необходими и достатъчни условия за избухване на решенията за крайно време и за глобалното им съществуване за задачата на Коши за нелинейното уравнение на Клайн-Гордън с полиномиална нелинейност и критична начална енергия. Разглежданата задача моделира физически процеси като разпространение на напречни вълни в изотропен цилиндричен прът, разпространение на вълни с ненулево тензорно напрежение и др.
- Предложен е метод за получаване на точни решения на нелинейни частни диференциални уравнения, наречен *метод на простите уравнения* (SEsM⁴), който се основава на представяне на търсеното решение като функция на решения на едно или няколко прости диференциални уравнения. Показва се, че SEsM може да доведе до многосолитонни решения на интегрируеми нелинейни частни диференциални уравнения и до точни решения на неинтегрируеми нелинейни частни диференциални уравнения.

⁴От англ. Simple Equations Method (бел. ред.)

- Разработен е нов метод за получаване на параметризирано решение на линейна алгебрична система, съдържаща линейни ранк-едно зависимости между интервално-значни параметри. Точността на интервалното включване за решението е сравнено с това, получено чрез други методи. Направено е теоретично доказателство, подкрепено и с числов пример, че предложено от други автори приложение не е валидно в общия случай.

Резултатите от работата на колектива през двете години на проекта (декември 2018 – декември 2020 г.) са представени в общо 53 статии, в т. ч. публикувани статии – 47, приети за публикуване статии – 6, сред които 46 на брой са в научни списания и поредици с импакт фактор (IF, Web of Science) и/или импакт ранг (SJR, SCOPUS).

По-долу е дадено по-подробно представяне на някои от резултатите на научната задача, които не са споменати в горното кратко описание. Представянето е подготвено от автори на разработките.

3. Изчислителна наномеханика (Автори: **Петя Динева**, **Цвятко Рангелов**). Темата включва изследване на разсеяното поле, както и на фактора на интензивност на напрежението (ФИН) за наноупукнатини, подложени на хармонични плоски вълни в нехомогенна еластична [14], [15] и вискозоеластична [16] полуравнина и в нехомогенна магнито-електро-еластична равнина [7]. Автори на публикациите са: проф. **П. Динева** от Института по механика при БАН; проф. **Г. Манолис** от Университета Аристотел, Солун; доц. **Й. Стойнов** от Факултета по приложна математика и информатика при ТУ, София; проф. **Ц. Рангелов** от Института по математика и информатика при БАН.

С развитието на наномеханиката се наблюдава зависещ от размера феномен в разсеяното от пукнатина вълново поле, както и във ФИН за наноструктури с нееднородности, т. е. дефекти като отвори, включения и пукнатини с размери в интервала $10^{-9}m \div 10^{-7}m$. Механичните свойства на наноматериалите са съществено зависими от размера на нееднородностите, което може да се опише и обясни с методите на механика на непрекъснатите среди, като се отчете ефектът от повърхностното напрежение по свободната повърхност на разглеждания обект или по интерфейса между дефекта и средата чрез модела от [12]. В този модел интерфейсът между нееднородността и материала се разглежда като безкрайно тънка материална повърхност, която притежава собствени еластични свойства. Това води до промяна на класическите гранични условия за непрекъснатост на преместване и усилия по интерфейсната граница. Влиянието на повърхностното напрежение върху решението за вълновото поле в разглежданата среда е отразено в новите неklasически гранични условия.

В отбелязаните в началото на раздела статии задачата за намиране на разсеяното от нано-пукнатината Γ вълново поле се моделира в честотната област със система от елиптични частни диференциални уравнения (ЧДУ) в дивергентен вид с променливи коефициенти в полуравнината $R^2_{-}\{(x_1, x_2), x_2 < 0\}$ за [14], [15], [16] и в равнината R^2 за [7] с гранични условия върху наноупукнатината, получени от усилията на падащата вълна, както и допълнителните усилия поради отчитане на повърхностния ефект по свободните или интерфейсни линии. На безкрайност се предполага изпълнение на условия от тип Зомерфелд. За система от няколко взаимодействащи си наноупукнатини Γ_j , както е в [14], граничната задача е подобна.

Численото решение на граничните задачи следва следните две стъпки: 1) намиране на преместването върху линията на нанопукнатината; 2) намиране на решението на граничната задача – преместването и напрежението в областта извън пукнатината.

За 1), като се използва теоремата за взаимност на Бети в еластодинамиката и законите за съхранение [23], [6], се извежда еквивалентно на граничната задача, формулирана чрез ЧДУ, интегро-диференциално уравнение върху линията на нанопукнатината – нехиперсингулярно гранично интегрално уравнение (ГИУ) в усилия

$$(1) \quad \begin{aligned} \gamma_{rj}(t_r^{ff}(x, \omega) - t_r^M(x, \omega)) &= C_{ijkl}(x)n_i(x) \int_{\Gamma} [(\Sigma_{\eta pk}^*(x, \xi, \omega)u_{p,\eta}^{sc}(\xi, \omega) \\ &- \rho\omega^2 U_{qk}^*(x, \xi, \omega)u_k^{sc}(\xi, \omega)) \delta_{\lambda l} - \Sigma_{\lambda pk}^*(x, \xi, \omega)u_{p,l}^{sc}(\xi, \omega)] n_{\lambda}(\xi) d\xi, \quad x \in \Gamma, \end{aligned}$$

където: $t_r^{ff}(x, \omega)$ е усилието на падащата вълна, $t_r^M(x, \omega)$ е усилието, отчитащо във всяка точка на линията на нанопукнатината Γ повърхностния ефект, зависещо от тангенциалните производни на напрежението и от кривината в точките на нанопукнатината. Матричната функция $U_{qk}^*(x, \xi, \omega)$ е функция на Грийн и напрежението $\Sigma_{\lambda pk}^*(x, \xi, \omega)$ за нехомогенно полупространство с квадратично изменение на материалните параметри [15], докато в цялото пространство е фундаменталното решение и напрежението с експоненциално изменение на материалните параметри [7]; коефициентът γ_{rj} зависи от локалната геометрия в точката на наблюдение x . Известното преместване е $u_p^{sc}(\xi, \omega)$; $n_{\lambda}(\xi)$ са компоненти на нормалния вектор; тензорът на материалните параметри е $C_{ijkl}(x)$, където $C_{ijkl}(x) = C_{ijkl}^0 h(x)$, $h(x) = h_q(x) = (a_2 x_2 + 1)^2$, $a_2 \leq 0$ за задачите в полупространство, $h(x) = h_e(x) = e^{2(a_1 x_1 + a_2 x_2)}$ за задачата в цялата равнина. С C_{ijkl}^0 се означава тензорът на материалните параметри в хомогенния случай. В означенията в (1) запетая означава частна производна по последващия индекс и се предполага сумиране по повтарящите се индекси.

Решаването на (1) следва методологията за решаване на ГИУ [6]: (i) дискретизация на линията на пукнатината и апроксимация на неизвестните; (ii) числено пресмятане на интегралите със сингулярни ядра, както и на интегралите с безкрайни граници в допълнителния член на функцията на Грийн с Монте Карло метод; (iii) пресмятане на интегралите с регулярни ядра с метод на Гаус; (iv) формиране на матрицата на влияние с колокационен метод; (v) решаване на алгебричната система от уравнения и тестване на полученото решение за разсеяното вълново поле u_p^{sc} със съществуващи примери в литературата [1]; (vi) програмиране със системата Mathematica.

За 2), например в задачите за полупространство, като използваме формулите за представяне на решението и това, че усилието по свободната линия, както и на функцията на Грийн върху $x_2 = 0$, е нула, при $u_k(\xi, \omega) = u_k^{ff}(\xi, \omega) + u_k^{sc}(\xi, \omega)$ получаваме

$$(2) \quad \begin{aligned} u_j^{sc}(x, \omega) &= - \int_{\Gamma} \Sigma_{kij}^*(x, \xi, \omega) u_k(\xi, \omega) n_i d\Gamma, \quad x \in R_-^2 \setminus \Gamma, \\ \sigma_{pq}^{sc}(x, \omega) &= -C_{pqkl}(x) \int_{\Gamma} \Sigma_{ijk,l}^*(x, \xi, \omega) u_i(\xi, \omega) n_j d\Gamma, \quad x \in R_-^2 \setminus \Gamma. \end{aligned}$$

Като използваме (2), пресмятаме основната характеристика в механика на разрушенията – ФИН, което е коефициентът на главния член в асимптотиката на преместването във върха на пукнатината, а също разсеяното поле върху свободната

повърхност, т. е. границата на преместването при $x_2 \rightarrow 0$ за задачите в полупространство.

След общото описание на задачите и методите им за решаване, накратко ще се спрем върху основните резултати, получени в четирите статии.

В [15] се решава задачата за разсейване на хармонични вълни от нанопукнатини във функционално подредена изотропна полуравнина. Резултатите са с приложение в теорията на разрушения на наноматериали, в материалознанието и в обратни задачи за определяне на характеристиките на подповърхностни пукнатини.

В [7] се изучава разсейване на хармонични вълни на срязване от нано-пукнатини в непрекъсната нехомогенна магнито-електро-еластична равнина с експоненциална зависимост на материалните параметри. Представените параметрични изследвания показват степента на зависимост на концентрацията на напрежението около върха на пукнатината от размера на нанопукнатината, от големината на повърхностното напрежение, от свързаната природа на магнито-електро-еластичната среда, от честотата на падащата вълна и от степента на нехомогенност.

В [14] се изучава динамичното поведение на две колинеарни подповърхностни нанопукнатини във функционално подредено полупространство под влияние на перпендикулярна към свободната повърхност хармонична вълна. Параметричните изследвания илюстрират приложимостта на предложения механичен модел в теорията на функционално подредените нанокomпозити, както и изучаването на обратни задачи за определяне на местоположението на подповърхностните нанопукнатини.

В [16] се разглежда разсейване на хармонични вълни от подповърхностна нанопукнатина във функционално подредена вискозоеластична (следвайки модела на Зенер) полуравнина със свободна от усилия линия. Със серия от параметрични изследвания се изучава зависимостта на разсеяната вълна, както и концентрацията на напрежението около върховете на пукнатината от основните параметри на задачата като: нехомогенност, вискозоеластичност, взаимодействие на нанопукнатината и свободната линия.

Накрая ще отбележим, че представените резултати и методите за получаването им могат да се използват при бъдещи изследвания, свързани с оценка на динамичното поведение на нанопукнатини и включения в нехомогенни и пиезоелектрични и магнито-електро-еластични композитни материали с отчитане на повърхностния ефект по свободните и интерфейсни повърхности.

4. Математическо моделиране на треска денга: имунен отговор и епидемична динамика (Автор: Петър Рашков). Ще бъдат представени резултати от двете основни направления в математическото моделиране на треска денга:

- моделиране на епидемичната динамика, което изследва промените в броя заразени и заболели в човешката популация;
- моделиране на имунния отговор, което изследва взаимодействието между патогена – вирус денга (DENV) – и човешкия организъм.

Денга е остра хеморагична треска, разпространена в Югоизточна Азия, Африка и Южна Америка. Причинител е вирус денга от семейство *Flaviviridae*, който се предава на човек при ухапване от комари *Aedes albopictus* или *Aedes aegypti*. Вирусът DENV има четири варианта (серотипа), които циркулират успоредно, като

заразяване с един вариант на вируса не води до траен имунитет, а повторно заразяване с друг вариант е възможно и често води до тежка форма на болестта. По данни на СЗО *денга* е най-разпространеното от комари вирусно заболяване в света и докато през 2002 г. са били хоспитализирани около 500 000 души с *денга* [10], през последните години броят им се е увеличил значително [3] и са регистрирани отделни епидемични взривове в Южна Европа [11], [13]. С промените в климата и с увеличаване на потока от стоки комарите-преносители вече се разпространяват извън тропичния и субтропичния пояс, с което представляват реална опасност за развитие на епидемии от такива нови болести в Южна Европа. В България видът *Ae. albopictus* е засечен от 2011 г. насам, а *Ae. aegypti* се разпространява по югоизточното черноморско крайбрежие.

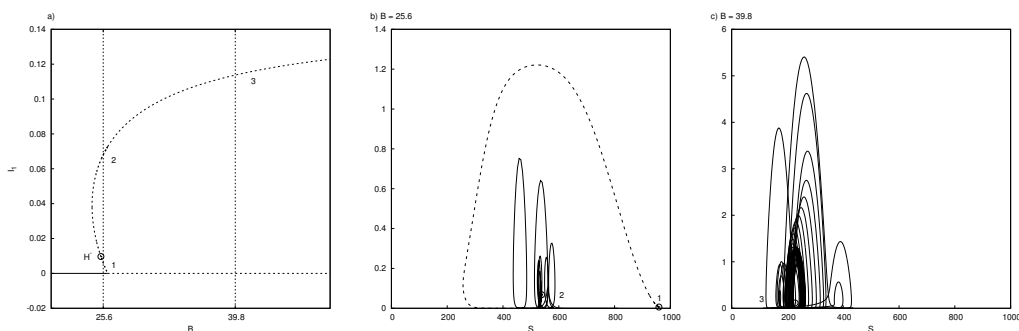
В рамките на Научна задача 1.2.3. от проекта ИКТВНОС са постигнати резултати и в двете направления, публикувани в статии [4] и [17].

В статия [4] предлагаме нов математически модел на имунния отговор при треска *денга*, който почива на нови експериментални наблюдения върху ролята на плазмощитоидните дендритни клетки. Известно е, че незрелите вириони на DENV, съдържащи се в кръвни проби от пациенти, по същество не са инфекциозни, тъй като неразрязаният белтък rгМ от обвивката им не позволява сливане с рецептори по клетъчната мембрана. Незрелите вириони обаче възвръщат пълната си инфекциозност, когато взаимодействат с анти-rгМ антители, а щом се образува комплекс от антиген-антитяло, се улеснява сливането им с клетки, експресиращи Fc-рецептори [18]. Това явление е познато като причинено от антигена усилване на инфекциозността при повторно заразяване (*ADE, antibody-dependent enhancement*) и се смята за фактор при по-тежкото протичане на болестта. Нивото на зрялост на вириона се регулира от експресията на ензима фуриин в заразените с вируса клетки и следователно съществува хетерогенност между отделните пациенти.

Нови експериментални наблюдения [5] установяват, че плазмощитоидните дендритни клетки взаимодействат различно с клетките, които произвеждат вириони с различна инфекциозност. Плазмощитоидните дендритни клетки имат важна роля при стартиране на имунния отговор при наличие на патоген, защото са мощни производители на сигналната молекула интерферон и могат да активират Т-лимфоцити. Досегашните математически модели на имунен отговор при *денга* не включват различни класове за инфекциозни и неинфекциозни вириони на DENV, нито плазмощитоидни дендритни клетки.

Предложеният в [4] математически модел на имунния отговор при *денга* включва двата класа за различните по свойства вириони и клас на плазмощитоидните дендритни клетки. Моделът е описан от нелинейна система от обикновени диференциални уравнения. Изчислено е базовото число на възпроизводство \mathcal{R}_0 като функция от дела на заразените клетки, произвеждащи неинфекциозни вириони. Направено е изследване на чувствителността на модела към промени в параметрите. Използвани са числени симулации от тип Монте Карло, за да се сравни имунният отговор при първо и повторно заразяване с *денга*.

Основните прогнози на модела са: (i) нелинейна зависимост между максимума на вирусната концентрация и времето от заразяване до нея при вариране на дела на произвеждащите инфекциозни вириони; (ii) максимум на произведения интерферон при среден дял на произведените инфекциозни вириони; (iii) немотононна зависимост



Фиг. 1. Обърната бифуркация при модела от статия [17] при зависимостта на класа I_1 , „еднократно заболели“ от DENV-1, от коефициента на заразност B . а) $S-H^-$ е означена субкритичната бифуркация на Хопф, с арабски цифри 1, 2 са изобразени началните точки на траектории, започващи в околност на двете неустойчиви ендемични равновесия за стойност $B = 25.6$, а с цифра 3 е изобразена началната точка за траекторията в околност на неустойчивото ендемично равновесие при стойност $B = 39.8$. Проекция на траекторията във фазовото пространство $S-I_1$ (S – клас податливи). б) Траекториите с начални точки 1 и 2 клонят асимптотично към елиминиране на заболяването. в) Траекторията следва хаотичен режим поради наличие на неустойчив граничен цикъл и неустойчиви равновесия от тип *конкурентно изключване*

между темпа на производство на плазмоцитонидни дендритни клетки от организма и максимума на активирани Т-лимфоцити. Резултатите могат да бъдат разгледани и изтъкнати както в еволюционен контекст, при който вирусът се стреми да максимизира възможността за своето предаване от човека към преносителя-комар, така и в контекста на имунорегулаторната система, където плазмоцитонидните дендритни клетки играят ролята на арбитър между вродения и придобития имунен отговор.

Мотивацията за изследванията в статия [17] идва от епидемичното моделиране на треска *денга* в човешка популация. Епидемиологични изследвания от Тайланд и Виетнам показват, че треска *денга* се характеризира с асинхронно, сезонно и хаотично разпространение, при което успоредно се срещат и четирите серотипа DENV-1 до DENV-4. За да изследваме епидемичната динамика при гостоприемника-човек и на преносителя-комар и тяхното взаимодействие, използваме епидемичен модел от тип податливи-заразени-отстранени (модел от тип SIR⁵) за гостоприемника и на податливи-заразени (модел от тип SI) за преносителя.

По-конкретно математическият модел включва два серотипа на вируса DENV-1/2 и временен кръстосан имунитет у гостоприемника. Това дава възможност за повторно заразяване на даден индивид с различен вариант на вируса. Също така е включен и ефектът от ADE, който увеличава вероятността за протичане на заболяването в тежка форма при повторно заразяване и следователно изменя възможността за предаване на патогена от заразен индивид към комар, защото повторно заболяният попада в болница и ограничава контакта с комари.

⁵от англ. Susceptible-Infected-Removed (бел. ред.)

Моделът е описан със система от 11 нелинейни обикновени диференциални уравнения. Изследвани са аналитично равновесните състояния на модела за наличие на точки, при които болестта е ендемична, в зависимост от базовото число на възпроизводство \mathcal{R}_0 . Установено е, че при $\mathcal{R}_0 = 1$ настъпва транскритична бифуркация и за $\mathcal{R}_0 > 1$ съществуват два вида ендемични равновесни точки с различни еко-епидемиологични свойства. Първият вид равновесия са винаги по двойки: един серотип на DENV измества другия (*конкурентно изключване*) и те са винаги локално асимптотично неустойчиви. При втория вид двата серотипа съществуват успоредно в човешката популация. Изведено е условие, при което има 2 равновесия на успоредно съществуване на двата серотипа и в случая $\mathcal{R}_0 < 1$ (тогава се наблюдава т. нар. *обърната бифуркация* или *backward bifurcation*). Резултати от числения бифуркационен анализ и симулации на траектории са изобразени на Фигура 1. Този анализ показва, че по отношение на динамичните свойства моделът се различава значително от предходен модел от тип гостоприемник-преносител [8].

С помощта на числен бифуркационен анализ въз основа на параметри от литературата са сравнени бифуркационната структура на модела с тази на предишни модели [2] от тип гостоприемник-гостоприемник с два варианта на вируса, при които преносителят е „скрит“ в епидемичните параметри. Анализът показва, че без изрично моделиране на сезонни вариации в популацията на комарите, моделът в [17] не може да възпроизведе хаотичната динамика на разпространение на вируса за биологично реалистични стойности на параметрите. Това се дължи вероятно на голямата разлика във времевите скали, при които протича динамиката при комарите и при човешката популация и която стабилизира динамичните им взаимодействия.

5. Нови ефективни стохастични подходи за анализ на чувствителност на сложен екологичен модел (Автор: Венелин Тодоров). Опазването на околната среда се нарежда сред водещите приоритети в нашето съвремие. Необходимо е да се проведат задълбочени научни изследвания и да се анализират прецизно основните физични и химични процеси, протичащи при преноса на замърсители, както и съпровождащите ги трансформации. Ефективното изпълнение на тази сложна задача изисква съвместни действия между специалисти в областта на моделирането на пренос на замърсители във въздушна среда, на числения анализ и научните пресмятания. Съществен дял от методите за приближено пресмятане на решението на големи задачи от изчислителната математика са методите от тип Монте Карло (МК) [9]. МК-методът може да гарантира, че грешката при приближеното пресмятане на неизвестната величина е по-малка от зададена стойност с определена вероятност. МК-методите са особено полезни за симулиране на явления със значителна несигурност във входната информация и системи с голям брой на обвързаните степени на свобода. МК-методите дават статистически оценки за функционал от решението при обработка на извадка на определена случайна величина, чието математическо очакване съвпада с търсения функционал. Ефективните МК-методи са от съществено значение за анализа на чувствителността (АЧ) на големи компютърни модели [20].

По-долу е представен модел с голяма размерност, описващ преноса на замърсители във въздуха. При решаването на такъв тип модели обикновено възникват трудности от изчислителен характер дори когато пресмятанията се извършват със

съвременни мощни компютърни системи. Затова е изключително важно моделът да бъде опростен (ако е възможно) при запазване на необходимото ниво на точност и надеждност на резултатите. Една възможност за постигането на тази цел е предварително да се проведе АЧ [19]. Въпросният анализ е съвременна перспективна техника за изследване на големи системи. Основната идея на АЧ е да оцени или прогнозира (чрез компютърни симулации) мярката за чувствителността на изходните резултати към пертурбациите на някои входни параметри. Математическата формулировка на задачата за АЧ се представя чрез множество от интеграли с висока размерност.

Унифицираният датски Ойлеров модел (UNI-DEM) [24] симулира процеси, свързани с преноса на замърсители във въздуха, и е разработен от Националния датски институт за изследване на околната среда с активното участие на учени от ИИКТ-БАН. Изчислителната област на модела включва целия Европейски регион, част от Азия и Средиземноморието. Моделът UNI-DEM е мощно средство за моделиране на въздушното замърсяване в глобален мащаб, разработван и използван повече от две десетилетия за пресмятане на концентрациите на голям брой химически вещества над голяма географска област (4800 × 4800 км). Моделът дава възможност да се проследят във времето концентрациите на голям брой замърсители, което е от важно значение за опазване на околната среда, селското стопанство и здравеопазването. В математическата формулировка на модела са отчетени всички основни физични процеси (адвекция, дифузия, депозиция, емисии и химични реакции). Чрез този модел могат да се изследват и основните видове химични замърсители (сулфидни, азотни, амонячни, озон, свободни радикали и въглеводороди). Моделът предлага възможност за използване на различни модификации на химичната схема. Схемата, която е използвана, е СВМ-IV (Carbon Bond Mechanism) и включва 35 замърсителя и 116 химични реакции, като 69 от тях зависят от времето. Схемата е предложена и подобрена в [25], като са добавени някои реакции, описващи образуването на сложни положителни амониеви йони в атмосферата. Уравненията в модела са обвързани в система именно чрез химичните реакции. Нелинейността и свойството „твърдост“ на системата от уравнения се определят основно от описанието на химичните процеси.

Моделът UNI-DEM се описва чрез следната система от частни диференциални уравнения [20], като броят на уравненията q е равен на броя на химичните замърсители:

$$(3) \quad \begin{aligned} \frac{\partial c_s}{\partial t} = & -\frac{\partial(uc_s)}{\partial x} - \frac{\partial(vc_s)}{\partial y} - \frac{\partial(wc_s)}{\partial z} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c_s}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c_s}{\partial z} \right) + \\ & + E_s + Q_s(c_1, c_2, \dots, c_q) - (k_{1s} + k_{2s})c_s, \quad s = 1, 2, \dots, q, \end{aligned}$$

където сме използвали следните означения: c_s – концентрации на химичните замърсители; u, v, w – компоненти на вятъра върху координатните оси; K_x, K_y, K_z – коефициенти на дифузия; E_s – емисии; k_{1s}, k_{2s} – коефициенти на суха и мокра депозиция; $Q_s(c_1, c_2, \dots, c_q)$ – нелинейни функции, описващи химичните реакции между замърсителите.

Сред най-важните процеси, протичащи при пренос на замърсители в атмосфе-

рата, са химичните реакции. Целта е да се предложи нов механизъм за изследване на чувствителността в нивата на концентрациите на някои важни замърсители като азотния диоксид и особено озона по отношение на скоростните константи на включените химични реакции в реален сценарий при пренос на замърсители във въздуха в Европа [24]. Пространствената област в модела е дискретизирана чрез мрежа с 96×96 възли в двумерната версия и $96 \times 96 \times 10$ възли в тримерната версия на модела. Стъпката на дискретизацията в хоризонталното направление е 50 км, а 10 неравномерни слоя се използват във вертикалното направление (височината на слоевете постепенно нараства, като най-ниският слой е най-близкият до земната повърхност). Изследвана е чувствителността на концентрацията на озон според варирането на скоростта на някои от химичните реакции на кондензираната схема СВМ-IV [9]. Целта е да се изследва как скоростните константи влияят върху съходните резултати [21]. Алгоритъмът, който е използван за АЧ [9], [24], [25], започва с разделяне на интервалите по всички направления на M подинтервала, като M е зададено като входящ параметър. За всяка подобласт се пресмятат съответният интеграл и дисперсия. След това получената дисперсия се сравнява с предварително зададена стойност. Резултатът от сравнението се използва за следващо разделяне на областта и за увеличаване на плътността на случайните точки. За определянето на първото, а по-нататък и на следващото направление, по което да се дели, се използват случайни числа. За да се избегне неравномерното разделяне по различните координати, алгоритъмът е конструиран така, че по дадена координата се прави повторно разделяне едва когато всички останали координати са били избрани. Алгоритъмът спира, когато за стандартното отклонение във всички получени след делението области е достигната предварително зададената точност. По този начин се получава едно приближение на интеграла чрез МК-метода. Изчислителната сложност на алгоритъма е пропорционална на размера на извадката и на броя на входните параметри.

Предполага се, че математическият модел може да се представи чрез моделна функция f_0 , която в случая описва разпределението на концентрацията на замърсителите в зависимост от стойностите на скоростните константи. Пълната дисперсия D на изходния параметър на модела се разлага на частичните дисперсии по аналогичен начин на разлагането на моделната функция, което представлява единствено представяне от типа ANOVA [22]. Пълният индекс на чувствителността S_i^{tot} представлява мярка за цялостното влияние (пълния ефект) на даден входен параметър върху колебанията в изходния резултат и се дефинира чрез дисперсиите на условните очаквания; S_i се нарича основен ефект (индекс на чувствителността от първи ред) на x_i , а $S_{i_1 \dots i_{j-1}}$ е индекс на чувствителността от j -ти ред (съответно двустранни взаимодействия за $j = 2$, тристранни взаимодействия за $j = 3$ и т. н.) за параметъра x_i ($2 \leq j \leq d$), където d е размерността на задачата. Алгоритмите, базирани на точково множество от тип решетка с генериращ вектор обобщената редица на Фибоначи (FIBO) и извадката латински хиперкуб (LHS⁶), имат неподобряем порядък на сходимост и досега са давали едни от най-добрите резултати за пресмятането на индексите на чувствителност. Получените резултати с *адаптивен* подход показват очаквания ефект на намаляване на относителната грешка при нарастването на броя

⁶от англ. Latin Hypercube Sampling (бел. ред.)

на реализациите – виж Таблица 1. Адаптивният алгоритъм и подобрената му модификация (Подобрен) отбелязват предимство пред останалите два алгоритъма при фиксиран брой реализации, което показва ефектът 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. Основното предимство на избрания подход за глобален анализ на чувствителността е възможността за пресмятане не само на индексите от първи ред, но и на индексите от по-висок ред. Пълният индекс на чувствителността на даден входен параметър може да се пресметне само с един интеграл с адаптивен МК метод аналогично на пресмятането на индексите от първи ред. Това превръща приложението адаптивен подход в един от най-ефективните изчислителни методи за пресмятането на всички индекси от първи ред и всички пълни индекси.

Таблица 1. Относителна грешка на индексите на чувствителност с различни стохастични подходи ($n \approx 65536$).

EQ	RE	Подобрен	Адаптивен	FIBO	LHS
f_0	2e-01	3.49e-05	3.72e-05	2.61e-04	2.02e-04
D	2e-03	3.01e-05	1.48e-04	1.97e-03	3.56e-04
S_1	4e-01	1.55e-04	3.48e-04	3.82e-02	3.04e-02
S_2	3e-01	4.34e-04	1.58e-04	1.03e-02	7.35e-04
S_4	3e-01	4.75e-04	9.04e-04	1.07e-02	2.47e-02
S_6	2e-02	1.08e-03	4.54e-04	1.32e+00	3.81e-02
S_1^{tot}	4e-01	7.18e-04	8.72e-04	7.92e-02	2.03e-02
S_5^{tot}	2e-04	8.53e-01	6.72e-01	8.85e+01	1.45e+01
S_6^{tot}	2e-02	8.32e-01	6.43e-01	2.15e+00	9.75e-01
S_{12}	6e-03	1.30e-02	7.92e-03	3.21e+00	8.99e-02
S_{14}	5e-03	5.30e-03	1.81e-03	8.64e+00	2.74e-01

Анализът на чувствителността и в частност получените резултати имат изключително важна роля, както за тестване и подобряване на математическите модели, така и за надеждна интерпретация на числените резултати от страна на съответните специалисти. Анализът, основан на дисперсията, е ефективен апарат за задълбочено проучване на зависимостта между отделните параметри, изходните резултати и вътрешните механизми, регулиращи разглежданата система. Определяйки основните химични реакции, влияещи върху поведението на системата, специалистите от различни приложни области ще могат да получат ценна информация за подобряването на модела, а това, от своя страна, ще доведе до повишаване на надеждността и устойчивостта на прогнозите. Така чрез анализ на чувствителността математическият модел ще подпомогне изготвянето на по-точни прогнози за въздействието на вредните емисии върху човешкото здраве и загубите в селското стопанство. Получените резултати показват, че разработеният стохастичен адаптивен подход е един от най-ефективните методи, основани на редуциране на дисперсията от гледна точка на изчислителна ефективност и точност.

REFERENCES

- [1] J. ACHENBACH, W. LIN, L. KEER. Surface Waves due to Scattering by a Near-surface Parallel Crack. *IEEE Trans Sonics Ultrasonics*, **30**, No 4 (1983), 270–276.
- [2] M. AGUIAR, B. W. KOOI, N. STOLLENWERK. Epidemiology of Dengue Fever: a Model with Temporary Cross-immunity and Possible Secondary Infection Shows Bifurcations and Chaotic Behaviour in Wide Parameter regions. *Math. Model Nat. Phenom.*, **3** (2008), 48–70.
- [3] S. BHATT et al. The Global Distribution and Burden of Dengue. *Nature*, **496** (2013), 504–507.
- [4] M. BORISOV, G. DIMITRIU, P. RASHKOV. Modelling the Host Immune Response to Mature and Immature Dengue viruses. *Bull. Math. Biol.*, **81** (2019), 4951–4976, DOI:10.1007/s11538-019-00664-3.
- [5] E. DÉCEMBRE et al. Sensing of Immature Particles Produced by Dengue Virus Infected Cells Induces an Antiviral Response by Plasmacytoid Dendritic Cells. *PLoS Pathog.*, **10** (2014), 1004434.
- [6] P. DINEVA, D. GROSS, R. MÜLLER, T. RANGELOV. Dynamic Fracture of Piezoelectric Materials. Solutions of Time-harmonic problems via BIEM. *Solid Mechanics and its Applications*, vol. 212, Springer Int. Publ., Switzerland, 2014.
- [7] P. DINEVA, Y. STOYNOV, T. RANGELOV. Dynamic Fracture Behaviour of Nanocracked Graded Magneto-electroelastic Solid. *Arch. Appl. Mech.*, 2020, DOI:10.1007/s00419-020-01835-8.
- [8] Z. FENG, J. X. VELASCO-HERNANDEZ. Competitive Exclusion in a Vector-host Model for the Dengue Fever. *J. Math. Biol.*, **35** (1997), 523–544.
- [9] R. GEORGIEVA. PhD Thesis, Sofia, 2010.
- [10] R. V. GIBBONS, D. W. VAUGHN. Dengue: an Escalating Problem. *British Med. J.*, **324** (2002), 1563–1566.
- [11] C. M. GOSSNER, E. DUCHEYNE, F. SCHAFFNER. Increased Risk for Autochthonous Vector-borne Infections Transmitted by *Aedes albopictus* in Continental Europe. *Eurosurveillance*, **23** (2018), 1800268.
- [12] M. E. GURTIN, A. I. MURDOCH. A Continuum Theory of Elastic Material Surfaces. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, **57** (1975), 291–323.
- [13] L. LAZZARINI et al. First Autochthonous Dengue Outbreak in Italy, August 2020. *Eurosurveillance*, **25** (2020), 2001606.
- [14] T. V. RANGELOV, P. S. DINEVA. Dynamic Fracture Behaviour of Two-nanocracks in Graded Half-plane. *AIP Conference Proceedings* **2321** (2021), 030030, <https://doi.org/10.1063/5.0040131>.
- [15] T. V. RANGELOV, P. S. DINEVA, G. D. MANOLIS. BIEM Analysis of a Graded Nano-cracked Elastic Half-plane under Time-harmonic Waves. *Z. Angew. Math. Mech.*, 100:e202000021:1–25, 2020, <https://doi.org/10.1002/zamm.202000021>.
- [16] T. V. RANGELOV, P. S. DINEVA, G. D. MANOLIS. Numerical Solution of Integro-differential Equations Modelling the Dynamic Behaviour of a Nano-cracked Viscoelastic Half-planes. *Cybernetics and Information Technologies*, **20**, No 6 (2020), 104–114.
- [17] P. RASHKOV, B. W. KOOI. Complexity of Host-vector Dynamics in a Two-strain Dengue Model. *J. Biol. Dyn.*, 2021, <https://doi.org/10.1080/17513758.2020.1864038>.
- [18] I. A. RODENHUIS-ZYBERT et al. Immature Dengue Virus: a Veiled Pathogen? *PLoS Pathog.*, **6** (2010), 1000718.
- [19] A. SALTELLI, S. TARANTOLA, F. CAMPOLONGO, M. RATTO. Sensitivity Analysis in Practice: A Guide to Assessing Scientific Models. Halsted Press, New York, 2004.
- [20] V. TODOROV, I. DIMOV, Tz. OSTROMSKY, S. APOSTOLOV, R. GEORGIEVA. Advanced Stochastic Approaches for Sobol’ Sensitivity Indices Evaluation. *Neural. Comput. & Applic.*, 2020, <https://doi.org/10.1007/s00521-020-05074-4>.

- [21] V. TODOROV, I. DIMOV, Tz. OSTROMSKY, Z. ZLATEV Advanced Quasi-Monte Carlo Algorithms for Multidimensional Integrals in Air Pollution Modelling. *Studies in Comp. Intel. Springer Series*, **902** (2021), https://doi.org/10.1007/978-3-030-55347-0_14.
- [22] V. TODOROV, I. DIMOV, Y. DIMITROV, Tz. OSTROMSKY, R. GEORGIEVA. Comparison of Quasi-Monte Carlo Methods Based on Faure and Sobol Sequences for Multidimensional Integrals. *AIP Conf Proc.*, **2164**, No 1 (2019), <https://doi.org/10.1063/1.5130792>.
- [23] C. ZHANG, D. GROSS. On Wave Propagation in Elastic Solids with Cracks. *Comput. Mech. Publ.*, Southampton, 1998.
- [24] Z. ZLATEV. *Computer Treatment of Large Air Pollution Models*. Dordrecht, Springer Netherlands, 1995.
- [25] Z. ZLATEV, I. DIMOV. *Computational and Numerical Challenges in Environmental Modelling*, Elsevier, Amsterdam, 2006.

Нели Димитрова

e-mail: nelid@math.bas.bg

Петър Бойваленков

e-mail: peter@math.bas.bg

Цвятко Рангелов

e-mail: rangelov@math.bas.bg

Петър Рашков

e-mail: p.rashkov@math.bas.bg

Венелин Тодоров

e-mail: vtodorov@math.bas.bg

Институт по математика и информатика

Българска академия на науките

ул. „Акад. Г. Бончев“, блок 8

1113 София, България

Петя Динева

Институт по механика

Българска академия на науките

ул. „Акад. Г. Бончев“, блок 4

1113 София, България

e-mail: petia@imbm.bas.bg

Венелин Тодоров

Институт по информационни

и комуникационни технологии

Българска академия на науките

ул. „Акад. Г. Бончев“ блок 25А

1113 София, България

e-mail: venelin@parallel.bas.bg

**COMPUTER AND MATHEMATICAL MODELLING
IN THE NATIONAL SCIENTIFIC PROGRAMME
“INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGIES
FOR A SINGLE DIGITAL MARKET IN SCIENCE,
EDUCATION AND SECURITY”**

**Neli Dimitrova, Peter Boyvalenkov, Petia Dineva,
Tsviatko Rangelov, Petar Rashkov, Venelin Todorov**

We propose a short description of the National Scientific Programme “Information and Communication Technologies for a Single Digital Market in Science, Education and Security” financed by the Bulgarian Ministry of Education and Science. More details are given on the achievements in the particular Scientific Problem 1.2.3, dedicated to elaboration of new mathematical methods and computational techniques for investigation and validation of dynamical models with various applications. Authors’ results on three particular topics in the framework of the Scientific Problem are included.