

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за присъждане на академичната длъжност професор по специалност 01.01.12 «Информатика» (Квази-Монте Карло методи и алгоритми) в професионално направление 4.6 «Информатика и компютърни науки», обявен за нуждите на ИИКТ-БАН, в «Държавен вестник» бр. 55 от 19 юли 2011 г., стр. 64 с единствен кандидат доц. д-р Анета Недева Караиванова

Рецензент: проф. дн Иван Томов Димов -

Институт по Информационни и комуникационни технологии при Българската академия на науките

1. Обща характеристика на научните резултати

Кандидатът доц. д-р Анета Недева Караиванова участва в конкурса за професор с публикации, чийто списък включва 68 научни труда, в това число: 10 публикации по дисертацията за образователната и научна степен доктор „Монте Карло методи за паралелна обработка” [41,42,43,44,45,58,59,60,61,62] – работите са публикувани в периода 1993-1996, и съдържат резултати в областта на Монте Карло методите и тяхното приложение; 11 публикации, представени за рецензиране в конкурса за старши научен сътрудник II степен през 2000 г. [33,34,35,36,37,38,39,40,57,63,68] – работите са публикувани основно в периода 1997-2000, и съдържат резултати в областта на Монте Карло и резултати по квази-Монте Карло за задачи на линейната алгебра; 47 работи са публикувани в периода след хабилизацията, 2001-2011, и съдържат нови резултати в областта на квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи и тяхното приложение за реални задачи. От тези работи, 40 са представени за участие в този конкурс. От представените 40 работи аз не разглеждам работи с номера [13, 25, 26, 30, 31], тъй като съм съавтор на кандидатката в тези работи. Всички представени за конкурса работи са публикуване след избирането на Анета Караиванова за доцент (ст.н.с. II ст.). Ето защо нито една от публикациите не е използвана в предходния конкурс. От представените работи, 30 са публикувани в издания с импакт фактор или в специализирани международни издания. Публикациите са в следните издания: Journal on Mathematics and Computers in Simulation – 3 публикации, [5,25,30]; Monte Carlo Methods and Applications – 2 публикации, [20, 21]; Journal of Scalable Computing: Practice and Experience – 2 публикации, [6, 10]; Journal of Applied Mathematical Modeling – 1 публикация, [13]; Journal of Earth Science Informatics – 1 публикация, [7]; Serdica Journal of Computing – 1 публикация, [9]; Journal of Int. Sci Publication: Ecology&Safety – 1 публикация, [12]; Springer LNCS – 16 публикации, [3,8,11,14,15,16,17,18,19,22,24,26,27,28,31,32] Springer MCQMC – 2 публикации [23, 29]. Работа [1] представлява ръкопис на монография на български език, която е приета за печат.

В материалите на кандидатката са документирани повече от 100 цитирания на нейни работи.

Търсенето, което направих в Quad Search показва, че Анета има общо 252 цитирания за всички свои работи, максимален брой цитирания 24 за една статия, средния брой цитати за статия е 3.8769, а нейния Hirsch Number (H-INDEX) е 9. Последният

индикатор е важен за мен, тъй като показва, че тя има 9 статии, които са цитирани най-малко 9 пъти. Тези данни са към 16.11.2011 г.

Тези данни свидетелстват за една много добра международна разпознаваемост на кандидатката.

В този смисъл, разглежданите научни проблеми и решаваните от нея задачи, в представените научни публикации, са в рамките на научната специалност на обявения конкурс 01.01.12 - «Информатика» (Квази-Монте Карло методи и алгоритми).

2. Приноси в представените за рецензиране работи

Получените резултати могат да бъдат характеризирани като създаване, изследване и паралелна реализация върху съвременни изчислителни системи на нови квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи и алгоритми за приближено решаване на интеграли, интегрални уравнения, елиптични гранични задачи и задачи на линейната алгебра.

Резултатите могат да се структурират условно в следните направления:

1. Квази-Монте Карло методи за задачи на линейната алгебра [9, 13, 18, 25, 27, 28, 29, 30, 46].
2. Квази-Монте Карло методи за гранични задачи [15, 16, 20, 21, 23, 24, 50]
3. Квази-Монте Карло за приближено пресмятане на многомерни интеграли [1, 3, 7, 10, 19, 22, 26, 31, 51].
4. Генериране и изследване на редици [1, 3, 11, 49, 51, 52].
5. Разработване и изследване на квази-Монте Карло методи, за решаване на квантови уравнения, описващи електронен транспорт в полупроводници и квантови жици. Гридификация и визуализация на числените резултати и анализ на изпълнението върху Грид [5, 6, 8, 14, 17, 22, 53, 54, 55].
6. Паралелни пресмятания и ефективна реализация върху съвременни изчислителни системи.

По първото научно направление Квази-Монте Карло методи за задачи на линейната алгебра [9, 13, 18, 25, 27, 28, 29, 30, 46] са създадени и са изследвани нови квази-Монте Карло методи и алгоритми за задачи от линейната алгебра, при които се работи с големи или много големи матрици. Тук искам особено да отбележа един нов хибриден метод за пресмятане на най-малката собствена стойност на матрица. Изследвана е сходимостта на квази-Монте Карло алгоритмите. Разглежданите задачи са преформулирани в термините на интегрални уравнения с подходящо избрани ядра и области. Това преформулиране позволява да се използва неравенството на Коксма-Хлавка при анализирането на сходимостта на разглежданите алгоритми. Теоретично и с числени експерименти е показано, че използването на квазислучайните редици подобрява скоростта на сходимост на съответните Монте Карло алгоритми. Следва, обаче особено да отбележа, че това твърдение е вярно само за така наречените обикновени Монте Карло алгоритми, при които не се използва

информация за гладкостта на решението. За всеки един от разгледаните алгоритми е пресметната изчислителната сложност, която има един и същи ред за съответстващите си Монте Карло и квази-Монте Карло алгоритми. Разработени са рандомизирани квази-Монте Карло алгоритми за матрични пресмятания с използване на разбъркани редици. Използването на квазислучайните редици подобрява скоростта на сходимост на съответните Монте Карло алгоритми, но не дава възможност за апостериорна оценка на грешката и не е подходящо за изпълнение в грид среда. Разбъркването на редиците позволява избягването на тези два недостатъка. При това, изчислителната сложност има един и същи ред за съответстващите си Монте Карло и квази-Монте Карло алгоритми. Програмите, реализиращи разработените алгоритми, са тествани върху Грид клъстерите на ИПОИ-БАН.

Всички алгоритми имат паралелни версии. Направените числени експерименти върху клъстер от работни станции с използване на MPI и показват много добра паралелна ефективност.

По второто научно направление „Квази-Монте Карло методи за гранични задачи“ [15, 16, 20, 21, 23, 24, 50] са конструирани и са изследвани нови квази-Монте Карло подходи за решаване на елиптически гранични задачи. Изследвани са хибридни и рандомизирани квази-Монте Карло варианти на случайно блуждаене по мрежа, случайно блуждаене по сфери, случайно блуждаене по кълба и случайно блуждаене по границата. Получени са теоретични оценки за скоростта на сходимост, алгоритмите са тествани върху различни моделни задачи и са приложени за изследване на електростатичните свойства на органични молекули в разтворител. Разработени са паралелни варианти, тествани върху високопроизводителни клъстери от работни станции и изчислителен грид. Разработени са квази-Монте Карло методи за решаване на задачи с разклоняващи се вериги на Марков. [11, 16]. Тук особено искам да обърна внимание върху резултатите, получени в работи [16, 20] и [24]. В [16] се разглежда задачата за пресмятане на електростатични характеристики на органични молекули в разтворител. Математическият модел включва решаване на две различни уравнения (уравнение на Поасон в неизпъкнала област G и уравнение на Лаплас в $R^3 \setminus (G \cup \partial G)$), свързани с гранични условия, които осигуряват непрекъснатост на решението. При това, в молекулярната електростатика не е нужно да се пресмята цялото решение, обикновено трябва да се пресметнат стойности на електростатичния потенциал и на електрическото поле в определени точки. По тази причина Монте Карло методите са успешна алтернатива на детерминистичните методи за решаване на такива елиптически гранични задачи. Трябва да се отбележи, обаче, че Монте Карло методите са добре развити за уравнения с постоянни коефициенти и класически гранични условия. Задачата, която се разглежда, изисква нови методи – в последните 3 години бяха предложени различни подходи, например комбинация от случайно блуждаене по сфери, случайно блуждаене в подобласти и апроксимация на граничните условия с крайни разлики. Тъй като ефективността на случайното

блуждаене зависи съществено от плътността на заряда извън молекулата, авторите на статията в предишна своя работа предложиха алгоритъм, включващ случайно блуждаене по границата δG за изпъкнала G , и специална квази-Монте Карло модификация на алгоритъма, която води до подобряване на скоростта на сходимост. В работа [24] се разглежда аналогична задача, като тук с цел ускоряване на сходимостта интегралното уравнение се параметризира и аналитично се продължава решението, представено в ред на Нойман, извън спектъра на интегралния оператор. Трансформираният ред има геометрична скорост на сходимост. За числено решаване на задачата се използва Монте Карло метод „блуждаене по границата“. В работата е предложен квази-Монте Карло вариант на метода. За целта при симулиране на направлението на новата точка от блуждаенето вместо обичайното използване на метода на селекцията, се използва метод на директното симулиране. Представени са резултати от числени експерименти, които показват леко подобрене на квазислучайния вариант в сравнение с Монте Карло.

В третото научно направление Квази-Монте Карло за приближено пресмятане на многомерни интеграли [1, 3, 7, 10, 19, 22, 26, 31, 51] са изложени основните Монте Карло, квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методи за приближено пресмятане на интеграли. Изследвана е приложимостта им, предимствата и недостатъците.

В представените публикации са конструирани, изследвани и реализирани паралелно върху различни изчислителни системи. Представен е квази-Монте Карло метод за приближено пресмятане на интеграли, вариант на „разделяне по важност“ (importance separation), който комбинира идеята за разделяне на областта на интегриране на равномерно малки подобласти с подхода на Кан за избор на преходна плътност в съответната област. Доказано е, че методът е с оптимален ред на сходимост за функции с ограничена производна. Методът е обобщен за интегрални уравнения [22]. Разгледани са адаптивни варианти на разделяне по важност и на обикновения Монте Карло метод [26]. Предложен е нов суперсходящ метод за решаване на многомерни интеграли, [19]. Методът се явява естествено развитие на метода „разделяне по важност“, като допълнително се прилага полиномиална интерполация в подобластите. Направен е анализ на стохастичната грешка. Изследвани са различни квази-аналози на Монте Карло методите с намалена дисперия (важна извадка с плътност, пропорционална на подинтегралната функция, важна извадка с метод на селекцията, важна извадка с изгладен метод на селекцията; претеглена равномерна извадка; метод на стратификацията и др.) с различни редици (случайни, псевдослучайни, квазислучайни, разбъркани) върху различни компютърни архитектури - високопроизводителни кълъстери, гридове и високопроизводителни графични карти, [3, 7, 10, 51].

В работите от четвъртото научно направление Генериране и изследване на редици [1, 3, 11, 49, 51, 52] е представена теорията за генериране на случайни,

псевдослучайни и квазислучайни редици, които се използват в научните изследвания. Разгледани са най-известните редици (на Собол, Холтън, Фор, Нидерайтер и др.), техните модифицирани и разбъркани варианти [1]. В [3] са изследвани линейни рекурентни редици над крайни пръстени, които са стриктно балансирани, т.е. всеки елемент се появява еднакъв брой пъти. За редици от втори и трети ред са намерени подходящи параметри. Конструирани са два генератора са тествани за пресмятане на многомерни интеграли. В [11] е представен алгоритъм, реализиращ метода на Оуен за рандомизиране на квазислучайна редица, адаптиран за пресмятане върху високопроизводителни графични карти с използване на CUDA. Разработен, тестван и използван за пресмятане на интеграли е грид-приложим генератор за разбъркана редица на Собол [49].

Изследвана е хибридна редица с размерност d , чиито първи n координати са координати на n -мерна квазислучайна редица, а следващите $d-n$ координати са псевдослучайни числа. Редицата е използвана в алгоритъма —случайно блуждаене по кълба за решаване на тримерна елиптична гранична задача, [23]. Изследвана е генерацията на истински случайни числа посредством устройството QRBG, [51, 52]. Използван е специален интерфейс към устройството, чрез който числата са достъпни онлайн.

Петото научно направление е „Разработване и изследване на квази-Монте Карло методи, за решаване на квантови уравнения, описващи електронен транспорт в полупроводници и квантови жици. Гридификация и визуализация на числените резултати и анализ на изпълнението върху Грид” [5, 6, 8, 14, 17, 22, 53, 54, 55]. Разработени са няколко версии на Грид приложение, наречено от авторите SALUTE (Stochastic ALgorithms for Ultra-fast Transport in sEMiconductors). То включва алгоритми от тип Монте Карло, квази-Монте Карло и хибридни алгоритми за изследване на ултра-бърз транспорт в полупроводници и квантови жици, както и схема за Грид изпълнение, специално разработен графичен интерфейс за работа върху Грид инфраструктурата, средства за наблюдение на изпълнението, анализ и визуализация на резултатите. Изследвана е изчислителната сложност на алгоритмите, обоснована е нуждата от използване високопроизводителни изчислителни системи, включително Грид-системи, и са предложени различни способи за максималното им натоварване. Част от резултатите са получени в съвместни работи на кандидата с доц. д-р Михаил Недялков, който е водещ специалист по моделиране на транспорт в полупроводници и квантови жици. Преносът на Анета Караиванова, обаче, може да бъде ясно дефиниран: разработени са два нови алгоритъма [22, 53]; изследван е квазислучайния подход за решаване на разглежданите задачи [6, 8]; изследван е хомогенния случай на задачата с приложено електрично поле – получени са нови резултати за физическите параметри [55]; разработена е първата завършена версия на приложението, в която са представени симулации върху грид за еднолентов проводник и квантова жица без приложено електрично поле (получени са резултати за 200 fs), [17]; разработени са схеми за ефективно

грид изпълнение, адекватни на развитието на грид мидълуера и грид услугите [54].

Шестото направление е „Паралелни пресмятания и ефективна реализация върху съвременни изчислителни системи”. В почти всички публикации са показани числени експерименти на предлаганите алгоритми върху високопроизводителни кълстери и/или върху изчислителен грид, а някои публикации специално изследват паралелната ефективност.

С цел ефективно изпълнение на приложенията, разработени са грид услуги и мидълуер, като са направени и в български издания с цел популяризиране на възможностите на съвременните изчислителни системи, например [67].

3. Публикации и цитирания на публикации, участващи в конкурса.

Актуалността и значимостта на научните и научно-приложните приноси са безспорни. Те следват от фактите, че по-голямата част от публикациите са в авторитетни специализирани издания с импакт-фактор.

Анета Караиванова е документирала 103 цитирания на нейни работи, което свидетелства за това, че нейни резултати се използват. От представените за конкурса публикации само 2 са самостоятелни, но в тази област е естествено да се работи в колективи. В същото време, личното участие на кандидата не буди никакво съмнение. Във всяка една от съвместните работи тя има нужния съществен принос.

4. Учебно-преподавателска дейност и участие в проекти.

Доц. Анета Караиванова е лектор по 5 университетски курса през последните 5 години. Един неин докторант успешно е защитил дисертация под нейно ръководство. Тя е участвала в 9 международни и 5 национални проекти през последните 5 години. Участвала е в редица организационни и програмни комитети на международни конференции. Има 8 поканени лекции.

5. Забележки и препоръки.

Нямам особени забележки и препоръки към Анета Караиванова. Забелязал съм някои малки неточности в цитиранията и формулировките в книгата, написана на български език и приета за печат. Например, българската дума за „порядък” е „ред”. Тези забележки са обсъдени с Анета Караиванова. Забелязаните неточности ни най-малко не снижават достойнствата на изследванията на доц. Караиванова, която е един изграден водещ специалист.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ. Въз основа на изтъкнатото дотук е ясно, че кандидатът по обявения конкурс доц. д-р Анета Недева Караиванова отговаря напълно на

изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в БАН, както и Правилника за специфичните условия за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в Института по Информационни и комуникационни технологии при Българската академия на науките. Постигнатите научни резултати ми дават основание да предложа да бъде избран кандидатът доц. д-р Анета Недева Караиванова за професор в ИИКТ-БАН в професионално направление 4.6 «Информатика и компютърни науки», научна специалност: 01.01.12 „Информатика” (Квази-Монте Карло методи и алгоритми). Поради това моето заключение за заемане на обявената по конкурса академична длъжност "Професор" от доц. д-р Анета Недева Караиванова е строго ПОЛОЖИТЕЛНО.

18.11.2011

София

Проф. д-р Иван Томов Димов