

РЕЦЕНЗИЯ

от д-р Светозар Димитров Маргенов

професор в ИИКТ – БАН

на материали, представени за участие в конкурс

за заемане на академична длъжност “професор” към ИИКТ – БАН

в професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки,

научна специалност 01.01.12 Информатика (Квази-Монте Карло методи и алгоритми)

След заповед № 95/26.09.2011 г. на директора на ИИКТ – БАН и решение на научното жури по процедурата (Протокол №1 от 29 септември 2011 г.) съм избран за рецензент на конкурс за професор, обявен в Държавен вестник (бр. 55 от 19 юли 2011 г. стр. 64). Документи за участие в конкурса е подала доц. д-р Анета Недева Караиванова от ИИКТ – БАН.

1. Кратки биографични данни

Доц. д-р Анета Недева Караиванова е завършила ФМИ при СУ “Св. Климент Охридски”. От 1989 е на работа в БАН съответно (след преименуване или реструктуриране) в КЦИИТ, ЦЛПОИ, ИПОИ и ИИКТ. През 1997 г. защитава дисертация за придобиване на научната степен “кмн” (сега образователна и научна степен “доктор”), а през 2001 г. е избрана за ст. н.с. II ст. (сега доцент). В периода септември 2001 г. – ноември 2003 г. е гост-изследовател в Държавния университет на Флорида в Талахаси, САЩ.

2. Общо описание на представените материали

Представеният от доц. Анета Караиванова комплект материали е изготвен в съответствие със ЗРАС, ППЗРАС, както и специфичните изисквания в правилниците на БАН и на ИИКТ – БАН. Комплектът включва: молба, автобиография, копие на диплома за образователната и научна степен “доктор”, медицинско свидетелство, свидетелство за съдимост, списъци на научни публикации и копия на представените за участие в конкурса публикации, списък на цитиранията, обща характеристика и резюмета на представените за участие в конкурса научни публикации, списък на научни проекти, копие на диплома за придобиване на академично звание ст. н.с. II ст. (доцент), резюме на учебна дейност във ФМИ на СУ “Св. Климент Охридски”, служебна бележка за защитил докторант (София Ивановска).

За участие в конкурса доц. Анета Караиванова е представила 40 научни публикации, обхващащи периода 2001 г. – 2011 г. (приложен е и общ списък от 68 публикации), от

които 38 на английски и 2 на български език. В списания са публикувани 11 статии от които 9 в международни и 2 в български, 20 статии са в научни поредици или тематични сборници на авторитетни международни издателства (от тях 16 в Springer LNCS), 8 са доклади в томове на международни конференции и една книга подготвена за печат. Две от публикациите са самостоятелни, 9 са с един съавтор, а останалите са с повече съавтори. В издания с “импакт фактор” са 13 статии, в това число в Mathematics and Computers in simulation - 3 (IF 0.946, IF 0.812, IF 0.960), Journal of Applied Mathematical Modelling - 1 (IF 0.931).

3. Обща характеристика на дейността на кандидата

Доц. Анета Караиванова е изявен учен с утвърден международен авторитет в областта на квази-Монте Карло методи за задачи с вериги на Марков и разработването на тази основа на ефективни алгоритми за задачи на линейната алгебра. Тя е водещ специалист в разработване на ефективни реализации и приложения върху съвременни изчислителни системи – изчислителни гридове и суперкомпютри, включващи паралелни Монте Карло и квази-Монте Карло алгоритми; скалируеми генератори на псевдослучайни числа и квазислучайни редици, приложения в реални задачи.

Доц. Анета Караиванова работи активно за популяризиране на стохастичните числени методи. Тя чете курсове “Стохастически числени методи и симулации – част I и част II” в бакалавърска програма “Статистика” и магистърска програма “Вероятности и статистика” към ФМИ на СУ “Св. Климент Охридски”, както и “Монте Карло методи” в магистърска програма “Приложна статистика” към НБУ. Ръководител е на успешно защитили докторант и дипломант по квази-Монте Карло методи, както и ръководител на първите два научни проекта в България в тази област, финансирани от НФНИ.

Член е на Програмните комитети на авторитетни специализирани международни научни конференции, включително най-важната верига конференции в областта на квази-Монте Карло методите – MCQMC, организатор на специални научни сесии и мини симпозиуми.

Доц. Анета Караиванова участва в 11 международни научни проекта по 6 и 7 РП на ЕК през последните 7 години. В редица от тях отговаря за координацията на работни пакети или обособени дейности.

4. Научни и научно-приложни приноси

Методите Монте Карло са едни от най-често използваните числени методи. Техните преимущества се засилват с увеличаване на размерността. По тази причина, те са основно средство за числено решаване на класове задачи в такива важни области, като физика на елементарните частици, инженерна химия, молекулярна динамика, финансова математика. Основно научно предизвикателство в развитието на съвременните Монте Карло методи е тяхната относително бавна скорост на сходимост, която в редица случаи има асимптотика $O(N^{-1/2})$, където N е размерът на извадката. Има два подхода за подобряване на сходимостта: а) намаляване на дисперсията на оценяваната величина; б) намаляване на дискрепанса на използваните редици.

Основните приноси на доц. Анета Караиванова са свързани с развитие на втория подход. Редиците с малък дискрепанс се наричат квазислучайни редици, като съответните методи са известни, като квази-Монте Карло методи (квази-МКМ).

Доказани са оценки за скоростта на квази-МКМ от вида $O(N^{-1}\log^s N)$, където s е размерността на задачата. За тяхното практическо приложение се разработват специални подходи, осигуряващи ефективни динамични оценки, които могат да бъдат използвани, като критерий за край. Такъв тип резултати са получени за т.н. рандомизирани квази-МКМ, при които се прилага допълнително разбъркване (scrambling) на квази-случайните редици. Важна част от представените по настоящата процедура резултати са свързани с разработването на високопроизводителни алгоритми за съвременни компютърни системи с паралелна архитектура, както и числени експерименти за класове задачи с голяма изчислителна сложност.

При анализа на основните научни и научно-приложни резултати в значителна степен ще следвам възприетата в авторската справка класификация.

4.1. Квази-МКМ за задачи на линейната алгебра [9, 13, 18, 25, 27, 28, 30, 46]

Доц. Анета Караиванова е измежду пионерите в тази област. Тук бих отбелязал изследваните нови и подобрени методи и алгоритми за решаване на системи линейни алгебрични уравнения с разредени матрици и намиране на екстремални собствени стойности на разредени матрици. За анализ на сходимостта на методите се прилага неравенството на Коксма-Хлавка, като за целта се използва вариационна (интегрална) формулировка на алгебричните задачи. За изследваните методи и алгоритми са получени оценки за изчислителната сложност. Разработени са рандомизирани квази-МКМ, които дават възможност за апостериорна оценка на грешката, която е приложима в случая на паралелна реализация. Изчислителната ефективност се подобрява допълнително, благодарение на използваните бързи генератори на квазислучайни числа.

4.2. Квази-МКМ за гранични задачи [11, 15, 16, 20, 21, 23, 24, 50]

Предмет на изследване в тази група работи са методи за числено решаване на елиптични гранични задачи. Нека припомним, че уравнението на Поасон е една класическа задача, илюстрираща възможностите на числените методи Монте-Карло. В представените публикации има съществени нови резултати, в това число нови 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. В статии [11, 16] са представени нови квази-МКМ с разклоняващи се вериги на Марков. Получени са теоретични оценки на скоростта на сходимост. Дълбокото познаване на същността на задачите от една страна, както и възможностите на квази-Монте Карло методите, са в основата на задълбочената интерпретация на получените резултати, в това число на присъщите преимущества и недостатъци, както и на възможностите за бъдещо развитие. В този контекст бих оценил и представеното интересно приложение за изследване на електростатични свойства на органични молекули в разтворител.

4.3. Квази-МКМ за приближено пресмятане на многомерни интеграли [1, 3, 7, 10, 19, 22, 26, 31, 51]

Това е фундаменталната задача за математическата формулировка, теория, интерпретация и бъдещо развитие на Монте Карло методите. В подготвената за печат

монография [1] са систематизирани основни резултати в областта на Монте Карло, квази-Монте Карло и рандомизирани квази-Монте Карло методите за числено пресмятане на многомерни интеграли. Във включените в тази група публикации са конструирани и изследвани различни изчислителни схеми, основаващи се на разделяне на областта на интегриране на подобласти. Водеща идея в този подход е да се търси такова разделяне, при което се осигурява балансирана висока скорост на сходимост. Тук специално бих отбелязал статия [19], в която е получен суперсходящ метод, в който идеята за “разделяне по важност” е обогатена с подходяща “полиномиална интерполация в подобластите”. Анализирана е стохастическата грешка, като теоретичната оценка е потвърдена от представените числени резултати. Естествено приложение на резултатите за числено пресмятане на интеграли са съответни методи за числено решаване на интегрални уравнения (виж напр. [22]).

4.4. Генериране и изследване на редици [1, 3, 11, 49, 51, 52]

Съвременната теория на генерирането на случайни, псевдослучайни и квазислучайни редици е представена в монографията [1]. Фундаментални резултати в тази основополагаща за Монте Карло методите област са свързани с имената на Собол, Холтън, Фор и Нидерайтер. Представените в тази група публикации включват следните типове резултати: а) конструирани и параметризация на балансирани линейни рекурентни редици над крайни пръстени; б) конструирани и изследвани на хибридни редици; в) разработване на паралелни алгоритми за високопроизводителни графични карти, реализиращи генерация и разбъркване. Изследвани са също така качествата на редици от “истински” случайни числа, генерирани от устройство QRBG (Quantum Random Bits Generator). Ефективността на разработените и изследвани нови генератори са приложени и тествани при числено пресмятане на интеграли и числено решаване на елиптични гранични задачи. Тук специално бих отбелязал новите алгоритми и подходи за паралелна генерация (виж напр. [11]).

4.5. Разработване и изследване на квази-МКМ за решаване на уравнения, описващи електронен транспорт в полупроводници и квантови жици [5, 6, 8, 14, 17, 22, 53, 54, 55]

Компютърното моделиране на пренос на токови носители в полупроводникови прибори е задача с много важно значение за развитието на съвременните компютърни технологии, като при това процесите на динамика на електроните, се описват с помощта на функции, които имат директна вероятностна интерпретация. Всичко това прави представените в тази група резултати особено актуални и интересни. Те включват изследвания свързани с Грид приложение, наречено SALUTE (Stochastic ALgorithms for Ultra-fast Transport in sEmiconductors), в това число специализирани паралелни алгоритми от тип Монте Карло, квази-Монте Карло и хибридни алгоритми за изследване на ултра-бърз транспорт, описван с обобщения на класическото уравнение на Болцман и уравненията на Бъркър и Фери. Разработен е специализиран графичен интерфейс за работа и мониторинг на изпълнението върху Грид инфраструктура. Изследвана е изчислителната сложност на алгоритмите, обоснована е необходимостта от използване на високопроизводителни изчислителни системи и са приложени различни подходи за повишаване на производителността и паралелната ефективност.

В заключение към този раздел ще отбележа специално още веднъж, че предложените и изследвани методи и алгоритми са програмно реализирани. Специално внимание е отделено на тяхната паралелна ефективност и в частност изпълнението им върху съвременна Грид инфраструктура. Тези резултати имат важно значение за успешното формиране, утвърждаване и развитие на тематиката на секция "Грид технологии и приложения".

5. Отражение на научните публикации на кандидата

В представената справка на кандидата е даден списък 103 забелязани цитирания на 35 научни публикации.

Ще отбележа специално няколко от работите с повече цитати:

[40] Karaivanova A., I. Dimov (1998), "Error Analysis of an Adaptive Monte Carlo Method for Numerical Integration", *Mathematics and Computers in Simulation*, Elsevier, 47 (1998), 201-213 – **10 цитирания**, в това число в монография на M. Kalos, P. Whitlock, Wiley-VCH 2008, както и в статии в *Mathematics and Computers in Simulation* (IF: 0.946), *Physics in Medicine and Biology* (IF 2.781)

[31] Karaivanova, A., Dimov, I., Ivanovska, S., A quasi-Monte Carlo method for integration with improved convergence, *Large-Scale Scientific Computing*, Springer LNCS, 2179 (2001), 158-165 – **6 цитирания**, в това число във *Physics in Medicine and Biology* (IF 2.781), *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, *Journal of Tsinghua University*.

[29] Mascagni, M., A. Karaivanova, A parallel quasi-Monte Carlo method for computing extremal eigenvalues, *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2000*, (2002), 369-380 – **6 цитирания**, в това число в *ANZIAM Journal*.

[25] Alexandrov V.N., Dimov I.T., Karaivanova A., Tan C.J.K., Parallel Monte Carlo algorithms for information retrieval, *Mathematics and Computers in Simulation*, 62 (3-6) (2003), 289-295 – **6 цитирания**, в това число в *Advanced Studies in Contemporary Mathematics, Engineering Economics, Technological and Economic Development of Economy*.

От представените 103 цитирания, 65 са в работи на чуждестранни автори. Много от цитиранията са в авторитетни специализирани международни списания и поредици. Всичко това ми дава основание да направя извода, че публикациите на доц. Анета Караиванова са следени и ценени от научната колегията.

6. Оценка на личния принос на кандидата

Както вече отбелязах, голяма част от представените по настоящата процедура публикации са в съавторство. Трябва да подчертая, че това е обосновано от естеството на работата в предметната област на изследванията. Убеден съм, че в съвместните публикации доц. Анета Караиванова има водеща роля по темата на конкурса, а именно конструирането и анализа на квази-Монте Карло методи и ефективни алгоритми за тяхната реализация.

7. Критични бележки

Нямам критични бележки по същество относно представените от доц. Анета Караиванова материали по конкурса. Както вече бе отбелязано в началото на рецензията, те напълно отговарят на нормативните изисквания на ЗРАС, ППЗРАС, както и на специфичните изисквания в правилниците на БАН и на ИИКТ – БАН.

Считам, че подготвената за печат монография притежава безспорни качества и трябва да се намерят възможности за нейното ускорено отпечатване.

8. Лични впечатления

Познавам от дълги години Анета Караиванова. От 1989 г. имам непосредствени впечатления от работата и в БАН, последователно в КЦИИТ, ЦЛПОИ, ИПОИ и ИИКТ. Анета Караиванова се ползва с авторитета и доверието на колегите си. Работи много добре в екип, като успява да предаде това много важно качество на студентите и младите колеги от секцията.

Доц. Анета Караиванова е утвърден учен с висок международен авторитет. Присъствал съм на много нейни доклади на научни форуми у нас и в чужбина, където съм бил свидетел на най-положителни отзиви за резултатите, които е представяла.

9. Заключение

След запознаване с материалите по конкурса, комплексния анализ на представените в тях качества на кандидата, в това число на научните и научно-приложни приноси, **убедено препоръчвам доц. д-р Анета Караиванова да бъде избрана на академичната длъжност “професор” към ИИКТ - БАН в професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки, научна специалност 01.01.12 Информатика (Квази-Монте Карло методи и алгоритми).**

14.11.2011 г.

София