

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурса за заемане на академичната длъжност "доцент"
в секция "Паралелни алгоритми" на ИИКТ-БАН
обявен в ДВ, брой 86/17.10.2014 в областта на висшето образование: 4.
Природни науки, математика и информатика, професионално направление: 4.5
Математика, научна специалност: 01.01.13 – Математическо моделиране и
приложение на математиката (приложения в микроелектрониката) с единствен
кандидат д-р Жан Мишел Селие

Рецензент: доц. дн Михаил Христов Недялков -
Институт по Информационни и Комуникационни Технологии
при Българската Академия на Науките

1. Биографични данни

Кандидатът Жан Мишел Селие е роден през 1976 година в град Сиракуза, Сицилия, Италия. Има френско и италианско гражданство а в момента е постоянно пребиваващ и работещ в България. През 2000 година завършва университета в Катания с магистърска степен по специалност "Математика", където пет години по-късно успешно защитава и дисертация в областта на математическото моделиране на полупроводникови прибори под ръководството на известния в областта професор Армандо Майорана. След това е бил пост-докторант в престижни научни организации като ИНРИА, Франция, Империял Колидж, Англия, а от 2008 до 2012 в Университета в Пърдю където последно заема длъжност на асистент-професор с което формално удовлетворява точка 2 от член 24 от Условия и ред за заемане на академичната длъжност "доцент" (ДВ брой 101 от 2010г.). От края на 2012 до днес д-р Селие заема позиция на пост-докторант в секция "Паралелни алгоритми" на ИИКТ по проекта АКОМИН.

2. Публикации и цитирания на публикации, участващи в конкурса

Кандидатът, д-р Жан-Мишел Селие участва в конкурса с 25 научни публикации, като има и още три, които са в процес на рефериране. Те няма да бъдат разглеждани но заедно с тях кандидатът е написал над 20 статии през последните две години, което показва изключителна му активност. Всичките 25 труда представени за конкурса са излезли от печат в специализирани международни издания и не са представяни за участие в предходни конкурси. От тях 13 са в списания с IF измежду които такива уважавани списания като Applied Physics Letters и Computer Physics Communication с IF над 3. Три от статиите са в списания са с SJR, а 8 труда са в реферирани сборници от международни конференции издадени в поредици на "Springer" (3), IEEE (5). Актуалността и значимостта на научните и научно-приложните приноси са безспорни, в авторитетни списания и съавтори - водещи световни имена в областта на математическото моделиране и приложение на модели на физични системи.

Кандидатът е представил списък от 23 цитирания които се отнасят в по-голяма част до работите публикувани преди 2013г., което не е неочаквано, поради това, че е необходимо технологично време за да се появят цитирания на работите публикувани през последните две години. Независимо от това, високата оценката за научните приноси на кандидата се илюстрира от поканените доклади за последната година: в FP7 FET-Empowering Young Explorers , Солун, 2014, в изключително престижната в обласста на моделирането в микроелектрониката конференция International Workshop of Computational Electronics, Paris, 2014г., както и в International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM), Beijing, 2015г.

В какво точно се състоят приносите в представените за рецензиране работи.

3. Приноси в представените за рецензиране работи

Аз ще обрисувам ситуацията в областта на моделирането на транспорта на носители в микро- и нано-структури, която преди няколко години беше характеризирана от един рецензент по следния начин: "Подходът основан на функцията на Вигнер привлече със своите теоретични предимства вниманието на изследователите в областта на изчислителната електроника преди 20 години, но повечето групи скоро се отказаха поради многото проблеми при числената му реализация. От тогава все се намира по някоя група с математическа ориентация която се опитва да вдъхне нов живот в методологията. Обаче в края на краищата този метод никога не е дал достатъчно практични резултати които да хвърлят нова светлина в оперирането на реалистични и актуални електронни прибори." Наистина първоначално развитите детерминистични методи за решаване на уравнението на Вигнер създаваха проблеми в области с осцилиращо решение. Преди 15 години се появиха и първите Монте Карло алгоритми: базирани на разделяне на операторите (известни като алгоритми използващи affinity) и на анализ на спрегнатото интегрално уравнение на Вигнер (алгоритми използващи частици със знак). За десетилетие алгоритмите с affinity бяха усъвършенствани и използвани за прецизни симулации на реалистични структури като FinFET транзистори. С това тези алгоритми се утвърдиха като подход, но числените им особености не позволиха приложения извън едномерен транспорт. Вторият метод въведе още преди десетилетие концепцията за генерация на положителни и отрицателни частици които анихилират при срещата си във фазовото пространство при решаване на стационарни задачи определени от гранични условия. Ефективността на метода обаче остана далече от желаната докато не беше разработена и идеята за дискретно импулсно пространство. Статията Wigner Quasi-Particle Attributes: An Asymptotic Perspective публикувана в началото на 2013г. в Applied Physics Letters представя необходимите атрибути на устойчив и ефективен Монте Карло метод обобщен за времезависими задачи с начално условие. Статията докладва и първият голям триумф на метода: точното и устойчиво симулиране на Втория закон на Нютон - ускорението на начално състояние само чрез генерация и анихилация на частици с дискретни стойности на импулсите. В тази статия за пръв път се появява и името на Жан Мишел Селие, който се превръща много скоро в един от сериозните авторитети в областта. Ето списък на приносите му върху научното значение на които ще се спра по-нататък в рецензията.

1. - първо прилагане на метода за двумерен и тримерен електронен транспорт в прибори: статии номер 12 и номер 5; В частност важна стъпка е включването на разсейването от фонони в тримерни симулации - статия номер 5;

2. - изследване на ефекти на декохеренция и обратимост във времето свързани с вида на разсейването от различни видове повърхности и нерегулярности в полупроводниковата решетка- статия номер 11 и 5;
3. - първо прилагане на Вигнер Монте Карло метод за симулиране на квантови системи от много частици като неразличими фермиони статии номер 2,4, 8;
4. - първо прилагане на метода към задачи за пресмятане на електронни структури (density functional theory) статия номер 8;
5. - първо приложение на методите за глобален анализ на чувствителността към основни параметри на Вигнеров транспорт - статия номер 3.

Списъкът може да бъде продължен, но това са приноси с голяма значимост не само за дисеминацията на метода, за приложението му като ефективно средство за изследване на нови физични процеси и явления, но и за едно агресивно разпространяване на метода извън типичната област на едночастичен електронен транспорт, за многочастични задачи и пресмятане на електронни структури - проблеми които са по-типични за квантовата химия. Преди да започна да обсъждам приносите на доктор Селие искам да отбележа, че те имат два аспекта: математически и физически. Първо за всяко приложение към нова физична задача е необходимо творчески да се модифицира и адаптира алгоритъма и второ кандидатът представя анализ на симулационните резултатите изхождайки от основни физични принципи като по такъв начин дава обяснение на анализиранияте процеси и поведението на изчисляваните физични величини. Съществени са следните приноси:

1. Кандидатът осъществява първата реализация на метода на генерация и аниhilация на частици в дискретно импулсно пространство върху платформата Archimedes разработена пак от него за класическа Монте Карло симулация на полупроводникови прибори. При това, като правило при първа реализация трябва да се решат много практически проблеми, които обаче опират до взимане на решения в съгласие с фундаментални физични принципи, така че тази дейност може да се сравни по сложност с теоретичното извеждане на алгоритъма публикувано в списанието Monte Carlo Methods and Applications, където кандидатът е първи автор. Следващите дейности по оптимизация и апробация на метода са много успешни и започват от еталонната едномерна задача за еволюция на вълнов пакет, взаимодействащ с потенциална бариера, последвани от първите приложения на вече утвърдения алгоритъм към многомерни структури. Двумерната задача третира технологично актуални проблеми за ефектите на случайната позицията на заредени примеси в канала на MOSFET прибори, както и процеси на зареждане на дефекти в гейтовия окис. Също така се изследва квантовото поведение на единичен електрон в среда с подредена и не подредена структура на електричния потенциал. Получените симулационни резултати обясняват експериментални данни получени в резултат на скъпи измервания. Подходът полага основата на приложения на метода за приложения в един нов раздел на електрониката - solitary dopant optoelectronics, където поведението на прибора се контролира от разположението на изолираните примеси на молекулярно ниво. Накрая трябва да се отбележи и решаването на задача за тримерен транспорт където е изследван захвата на електрон от зареден център в резултат на разсейването с енергопоглъщащи фонони. Въпреки че алгоритъма за включване на разсейване от фонони е прилаган в задачи за едномерни структури и тримерно пространство на импулси, обобщаването му за тримерни структури е тежка задача предвид необходимата компютърна памет. Тази задача е решена чрез масивна паралелизация на изчисленията.

2. Влиянието на разсейването от повърхности е един много важен проблем в съвременната микроелектроника, защото влияе върху поведението на осъществяващата преноса на информация електронна система. При липсата на разсейване еволюцията на дадено квантово състояние остава кохерентна, което означава обратимост във времето и поддържане на информацията заложената в началното условие. Наличието на разсейване води до декохеренция свързана с необратимост във времето и загуба на информация, при което квантовото състояние постепенно преминава в класическо. Основен резултат тук е че в процеса на еволюцията трябва да се намеси случаен процес, например гладка повърхност с дифузно разсейване води до загуба на информация за разлика от грапава повърхност с огледално разсейване. Подобен е и ефекта от вибрации на решетката.

Изследванията на кандидата в тази област е важна не само за физиката на функциониране на приборите, но и с принос към създаване на квантови компютри.

3. Много съществен принос на кандидата е обобщаването на метода на Вигнерови частици със знак за многочастични физични системи. В случая на неразличими фермиони методът е модифициран и адаптиран като е добавена концепцията за неразличими частици. Показано е, че е достатъчно да се формулира антисиметрично по отношение на разместването на две частици начално условие, като при еволюцията на физичната система това свойство се запазва от уравнението и след включване на взаимодействието между фермионите. Анализът на симулационни резултати за два взаимодействащи електрона показва появата на Ферми, или обменно-корелационна дупка (exchange-correlation hole) в плътността, което пък показва, че решението удовлетворява принципа на Паули, според който два фермиона с еднакъв спин не могат да заемат едно и също състояние. По-нататък са симулирани системи от 4, 8 и 16 невзаимодействащи електрона, чиято еволюция в една затворена област и води до формиране на статистка на Ферми-Дирак за неразличимите частици. Тези теоретично известни резултати се получават за пръв път числено в рамките на Вигнеровата формулировка, което е сериозна стъпка за утвърждаването на числения подход . в една напълно нова област на приложение.

4. Теорията на функционали на плътността (Density Functional Theory) е изчислителен подход за моделиране на електронната структура на атоми, молекули и съединения, и е основен инструмент във физиката на много частици и квантовата химия. Основава се на теорията на Хартри-Фок за Кулоново взаимодействащи помежду си електрони и йони (положително заредени ядра), формулирана с помощта на уравнението на Шрьодингер, и две теореми на Хоенберг-Кон, които доказват, че основното състояние на системата се определя напълно от електронната плътност, като се извежда функционал на енергията, който в основното състояние има минимум. Теорията има много модификации, като са изведени нови функционали, развита е времезависима версия за пресмятане на възбудени състояния и т.н. В рамките на теорията на Кон-Шам системата взаимодействащи електрони се описва от невзаимодействащи електрони, движещи се в ефективен потенциал, който в частност зависи от индивидуалните им плътности и включва Хартри-Фок обменни и корелационни ефекти типични за Кулоново взаимодействащи системи от електрони и е валидна както за стационарни, така и за времезависими системи. Този кратък преглед на физичната постановка на задачата и на разработената теория показва както важността и за развитието на съответните научни области, така и изчислителната сложност на самата задача, като правило формулирана в термините на вълновата механика на Шрьодингер. Тук Жан Мишел Селие реализира една оригинална идея като преформулира цялата задача в термините на квантова механика във фазовото пространство. След това показва пригодността на Монте Карло метода на частици със знак за решаването на практически задачи в областта. Успешно са

решени задачите за литиев и боров атоми, както и за водородна молекула, при това е избрана по-сложната, времезависима формулировка. Затова е направена модификация на численият алгоритъм като уравненията на Вигнер за съответните частици се решават самосъгласувано с уравнението за ефективния потенциал до достигане на стационарно решение. С това се утвърждава както численият подход, така и уместността на прилагането на самата квантова теория на фазовото пространство за този клас задачи. Потенциалната критика на тази идея е, че това е самоцелен резултат, тъй-като броят на променливите в сравнение с формулировката чрез уравненията на Шрьодингер нараства два пъти. Отговорът е, че това е така за по-стандартни задачи: формулировката в термините на Вигнерова функция позволяват да се разшири физическата картина с нов клас явления базирани на процеси на разсейване и дисипация на енергия, нещо което не може да бъде направено с оригиналната вълнова формулировка на задачата. Това според мен е един от най-съществените приноси на кандидата.

5. Жан Мишел Селие е автор на първите приложения на метода на глобален анализ на чувствителността в моделирането и оптимизацията на полупроводникови прибори. Както показва кандидатът и неговите съавтори, този сравнително наскоро предложен от известният Монте Карло експерт И.М. Собол метод има голям потенциал в областта. В частност, той е приложен за изследване на зависимостта на волт-амперните характеристика на диод (целева функция) към 7 физични параметъра като плътности и дължини на различните области на прибора и на температурата. Това е и първият пример за това как анализът на чувствителността може да бъде директно използван при дизайна на прибори.

Кандидатът използва методът на Собол за да отговори на важния въпрос за точността и надеждността на Вигнер Монте Карло метода с частици със знак в зависимост от избора на един основен параметър наречен дължина на кохерентност, които определя някой от числените аспекти на алгоритъма. Използвана е типична задача за тунелиране на вълнов пакет, решението на която е известно и се сравнява с полученото чрез Вигнеровия алгоритъм решение. Пресмятат се три различни типа целеви функции, съответстващи на косинус-индикатор, L-2 нормата и L-безкрайност нормата, които дават различна перспектива на оценката и са в известен смисъл допълващи се. Анализът показва, че съществува широка област от стойности, при които дължината на кохерентност не влияе на поведението на алгоритъма и в този смисъл Вигнер метода е устойчив и надежден.

В този смисъл, разглежданите научни проблеми и решаваните от Жан Мишел Селие задачи, в представените научни публикации, са в рамките на научната специалност на обявения конкурс 01.01.13 - Математическо моделиране и приложение на математиката. Представените от автора научни публикации ясно очертават основната цел на изследвания – разработване и приложение на методи за математическо моделиране на процесите на Вигнер-квантова еволюция на физични системи.

4. Забележки и препоръки

Основната забележка, която имам се отнася за начина на цитирания в статиите на кандидата. Общоприетото правило е да се цитират статии, в които дадена идея се публикува за първи път, или които дават принос в областта преди цитиращата статия. Вместо това, в някои случаи д-р Селие цитира последно публикувани трудове, какъвто е стилът в някои американски инженерни дисциплини. Препоръчвам в такива случаи авторът да добавя думите 'за последен преглед по темата' следвани от съответния цитат, с което до голяма степен се избягват конфликти между двете системи. Направените бележки и препоръки ни най-малко не снижават достойнствата на изследванията на д-р Жан Мишел Селие, който е един изграден водещ специалист.

5. Заключение.

Въз основа на изтъкнатото дотук е ясно, че кандидатът по обявения конкурс доктор Жан Мишел Селие отговаря напълно на изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за прилагане на ЗРАСРБ, Правилника на БАН и Правилника за специфичните условия за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИИКТ-БАН, Постигнатите научни резултати ми дават основание да предложа кандидатът д-р Жан-Мишел Селие да бъде избран за „доцент” по специалността 01.01.13 „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в микроелектрониката)” за нуждите на секция "Паралелни алгоритми", ИИКТ-БАН.

10.02.2015

София