

Výroční zpráva Ústavu informatiky AV ČR za rok 2002

1. Vědecká činnost pracoviště a uplatnění jejích výsledků

Ústav informatiky AV ČR se zabývá základním a aplikovaným výzkumem v informatice a počítačových vědách. Hlavní výzkumné směry tvoří teoretická informatika, umělé neuronové sítě a nelineární modelování, výpočetní matematika a medicínská informatika. ÚI měl ke konci roku 137 zaměstnanců (průměrný přepočtený stav 103,6), z toho je 94 (průměrný přepočtený stav 68,6) vědeckých pracovníků.

Nejdůležitějšími výsledky vědecké činnosti ústavu jsou publikace poznatků v oboru informatiky. V roce 2002 bylo publikováno 10 knih nebo jejich částí, 49 článků v odborných časopisech, 53 příspěvků ve sbornících vědeckých konferencí a 40 výzkumných zpráv.

V oblasti teoretické informatiky byla prozkoumána významná zobecnění základní fuzzy logiky a byly pro ně dokázány věty o úplnosti (B). Byly nalezeny nové metody studia sémantických aspektů výpočtu branching programů (B). Byly identifikovány další případy emergence super-Turingovské výpočetní síly v evolučních interakčních systémech (B). Byly vyšetřovány posibilistické míry definované jako parciální množinové funkce, vnitřní a vnější míry, minimální posibilistické zúplnění a vzájemné vztahy mezi těmito funkcemi (B). V oblasti teorie učení neuronových sítí byly odvozeny odhady přesnosti aproximace optimálního řešení pomocí sítě dané složitosti, které zahrnují též globální vlastnosti jako např. hladkost a typ oscilací (B). Bylo ukázáno, jak lze pro popis softwarových komponent využít tzv. "protokoly chování", které jsou dostatečně čitelné pro praktické použití při vývoji těchto systémů a dovolují automatizovaně ověřovat, zda implementace systému odpovídá jeho formálnímu popisu (C).

V oblasti numerických metod byly ukázány překvapivé a zásadní souvislosti mezi rychlostí konvergence krylovovských metod minimalizujících reziduum a ovlivněním výpočtu zaokrouhlovacími chybami. Tyto výsledky přetvářejí základy teorie lineárního modelování úloh s nepřesnými daty (B). V oblasti analýzy krylovovských metod byla prohloubena teorie řešení problému sedlového bodu s indefinitním předpokmáněním a byla popsána struktura možných zobecnění metody konjugovaných gradientů (C). Byla ukázána zásadní souvislost mezi ztrátou ortogonalit Arnoldiho vektorů a konvergencí zobecněné metody minimálních reziduí (GMRES), implementované s použitím modifikovaného Gram-Schmidtova procesu (C). Byl navržen paralelní řešič rozsáhlého problému markovovských řetězců (C). Ve skupině matematického modelování byla publikována řada prací věnovaných problémům elasticity a termoelasticity, ve kterých byla popsána diskrétní aproximace řešení jednotlivých úloh metodou konečných prvků (C). Pokračovala práce na vývoji metod s proměnnou metrikou a dále byla rozvíjena teorie speciálních matic (C).

V oblasti neuronových sítí a nelineárního modelování byly zdokonaleny algoritmy pro optimalizaci shody klasifikačních a regresních stromů s trénovacími daty a vylepšena technologie numerických experimentů (B). Analýzou dilatometrických měření trhlin v pískovcových svazích byly nalezeny vlastnosti dynamiky svahu umožňující predikci jejich zřícení (C). Byl navržen model neuronové sítě s přepínacími a korekčními jednotkami pomocí genetických algoritmů, a úspěšně aplikován na separaci simulovaných dat z gama teleskopu Magic (C). Byl formulován nový přístup k řešení známého 13. Hilbertova problému pomocí kvantové mechaniky (B). Bylo prokázáno, že spojitě rozdělení má svou skórovou funkci rozdělení, popisující citlivost jeho těžiště k hodnotě proměnné (B). Byly započaty práce na vývoji asimilačních algoritmů pro regionální modely předpovědi počasí a kvality ovzduší (B).

V oblasti medicínské informatiky byl vyvinut nový typ minimálního modelu pro kardiologii (C). Další výsledky bylo dosaženo při vývoji nového typu elektronického zdravotního záznamu (C). Byly vyvinuty nové přístupy k formalizaci lékařských doporučení pro kardiologii a aplikovány metody data mining pro analýzu medicínských dat (C).

V loňském roce se podařilo získat celkem 5 mladých vědeckých pracovníků, vesměs na částečné úvazky. ÚI se však stále potýká s odchodem schopných studentů do podnikatelské sféry. ÚI se snaží o popularizaci informatiky organizací Dnů otevřených dveří, články v populárních časopisech (Vesmír, PCWorld, Chip a Computerworld) a spoluprací s Tiskovým odborem KAV.

2. Spolupráce pracoviště s vysokými školami

ÚI má dvě společné laboratoře s MFF UK a FD ČVUT a je zastoupen jako hlavní řešitel či spoluřešitel ve třech výzkumných centrech. V rámci společné Laboratoře spolehlivosti systémů (s FD ČVUT) byl řešen projekt multimediálního vozidla. Řešenou etapou letošního roku byla příprava a laboratorní realizace on-line informační služby regionální předpovědi počasí s využitím elektroniky vozu. V rámci činnosti výzkumného centra Institut teoretické informatiky (spolu s MFF UK) bylo prokázáno, že optimalizace shody klasifikačních a regresních stromů s trénovacími daty vede v některých úlohách ke špatným generalizačním vlastnostem v porovnání s metodami založenými na rekurzivním dělení. Dále bylo dokázáno, že učení i jen jednoho sigmoidálního neuronu je NP-težký problém. V rámci činnosti výzkumného Centra aplikované kybernetiky (spolu s FEL ČVUT) byla zdokonalena optimalizace návrhu neuronových sítí pomocí genetických algoritmů. Oddělení medicínské informatiky, jež je součástí dvou pracovišť EuroMISE Centra UK a AV ČR a EuroMISE Centra–Kardio, vyvinulo minimální model pro kardiologii, nový typ elektronického zdravotního záznamu a nové přístupy k formalizaci lékařských doporučení pro kardiologii. V těchto oblastech oddělení úzce spolupracuje s 1. LF UK, PŘ UK a MFF UK a s VŠE v Praze.

Další spolupráce s VŠ probíhala v oblasti numerické matematiky (FJFI ČVUT, TU Liberec), softwarového inženýrství (MFF UK Praha), chemické informatiky (Univerzita Pardubice), regionálních modelů kvality ovzduší (MFF UK Praha), neurofyziologie (3. LF UK) a neuronových sítí (VŠE).

ÚI má akreditovány 4 doktorské studijní programy v oblasti informatiky a aplikované matematiky společně s MFF UK v Praze (Teoretická informatika, Softwarové systémy, Algebra, teorie čísel a matematická logika, Vědecko-technické výpočty), dva DSP s FEL ČVUT a jednoho s FJFI ČVUT. Připravují se další návrhy na akreditace (ZČU Plzeň).

3. Spolupráce pracoviště s dalšími institucemi a s podnikatelskou sférou

Na základě hospodářských smluv probíhá spolupráce se Západočeskou plynárenskou, a.s. Plzeň na vývoji matematického modelu pro výpočet nevyfakturované složky zemního plynu (společně s firmou GASIS). Společně s firmou SINCO jde o spolupráci s regionálními distribučními plynárenskými společnostmi na vývoji predikčních modelů pro spotřebu zemního plynu. V EuroMISI Centru–Kardio probíhá spolupráce se dvěma nemocnicemi (VFN v Praze, Městská nemocnice v Čáslavi) i s dalšími zdravotnickými pracovišti, např. Revmatologickým ústavem, Státním zdravotním ústavem, Vinohradskou nemocnicí, Střešovickou nemocnicí, nemocnicí Bulovka, IKEM. Ve spolupráci s Elektrotechnickým zkušebním ústavem Praha byly prováděny předcertifikační, certifikační a dozorové audity Systému jakosti podle norem ČSN EN ISO 9000 v organizacích, zabývajících se vývojem hardware, software a informačních technologií. ÚI má zástupce ve radě ředitelů Evropského výzkumného konsorcia pro informatiku a

matematiku ERCIM, vědecké radě programu TECHNOS MPO ČR a experty MZ ČR v oblasti standardizace a informačních systémů a experty Evropské komise zastupující ČR ve Working Party, Information Society Technologies, Health Care.

4. Mezinárodní vědecká spolupráce pracoviště

Řešitelské týmy ÚI se podíleli na následujících mezinárodních projektech: *Appetise* (5. RP EU), *HiperGeos* (Copernicus), *Barrande* (Francie), *CERN* (EU), *TARSKI* (COST Action 274).

Výsledky v oblasti numerických metod lineární algebry byly dosaženy ve spolupráci s Emory University, Atlanta, McGill University, Montreal a TU Berlin; v oblasti metod pro řešení systémů nelineárních rovnic ve spolupráci s University of Bergamo. V oblasti medicínské informatiky probíhá spolupráce s univerzitou v Heidelbergu při vývoji databáze pro neurologii. Výzkum teorie učení neuronových sítí probíhá ve spolupráci s Università di Genova a Georgetown University, USA. Teorie super-Turingovských výpočtů se zkoumá ve spolupráci s Utrechtskou univerzitou. Výsledky z teorie fuzzy logiky vznikaly ve spolupráci s kolegy z Rakouska, Itálie, Španělska, Rumunska a Slovenska. Ve spolupráci s Institutem fyziky jadrovej v Krakově, byl testován model neuronové sítě při hledání Higgsova bosonu. Společně se Slovinskem vyvinuli pracovníci ÚI metoda k identifikaci směru působení v spřežených oscilátorech, která byla úspěšně aplikována na kardiorespirační data.

Mezi nejdůležitější mezinárodní akce pořádané ÚI patří konference *Computational Linear Algebra with Applications*, *Soft Computing Workshop* v rámci mezinárodní konference *SOFSEM*, *The second TARSKI meeting*, *APPETISE meeting*. Pracovníci ÚI jsou členy redakčních rad významných časopisů v oboru a programových výborů vědeckých konferencí.

K významným zahraničním vědcům, kteří loni navštívili ÚI AV ČR, patří I. S. Duff (Rutherford Appleton Laboratory, UK), Ch. Paige (McGill University, Montreal, Canada), M. Benzi (Emory University, Atlanta), M. Arioli (Rutherford Appleton Laboratory, UK), J. Langou (CERFACS, Toulouse Cedex, France), M. Bollhöfer (Technische Universität Berlin), J.-P. Zemke (Technische Universität Hamburg -Harburg), W. Proskurowski (University of Southern California, Los Angeles), J. Liesen (Institute of Mathematics, TU Berlin), R. Vodička (FS-TU Košice), B. C. Krüger (Institut für Meteorologie und Physik, Universität für Bodenkultur Wien), P. Blobel (Německo), P. Grant (Kanada).

5. Předpokládané hlavní okruhy vědecké činnosti pracoviště v příštím roce

V oblasti numerické matematiky se bude zkoumat teorie matic, teorie Krylovských metod, implementace a numerická stabilita iteračních metod, numerické metody souvisejících s řešením kontaktních úloh, jež se aplikují v oblasti věd o Zemi a biomechaniky. V oblasti nelineárního modelování proběhnou další analýzy klimatických řad, budou navrženy metody pro predikci koncentrací znečištění ovzduší. Vědecko-výzkumná činnost EuroMISE se soustředí na elektronické záznamy o nemocných, systémy pro podporu rozhodování, práci s nejistotou, analýzu dat, měření závislosti, přístupy teorie informace, mnohorozměrné statistické metody, matematické modely v genetice a epidemiologii. V matematické logice bude pokračovat výzkum matematických základů usuzování za vágnosti a nejistoty (fuzzy logika, pravděpodobnostní a posibilistické metody, teorie domněnkových funkcí). V oblasti neuronových sítí bude probíhat výzkum analýza aproximačních vlastností a složitosti. V teoretické informatice pokračuje výzkum výpočetní složitosti, kognitivních, neuronových, interaktivních a evolučních výpočtů, distribuovaného prostředí a objektivě orientovaných systémů.

Příloha 1. Anotace významných výsledků

Protokoly chování softwarových komponent

Jedním z významných směrů pro vývoj velkých softwarových systémů jsou softwarové architektury založené na komponentách. Aby bylo možné specifikovat a posléze zaručit funkčnost takto budovaného systému, je nutné co nejpřesněji popsat chování jednotlivých komponent. Tento článek ukazuje, jak je pro tento popis možné využít tzv. „protokoly chování“, které, ačkoli představují formální popis, jsou dostatečně čitelné pro praktické použití při vývoji těchto systémů. Jedním z významných výsledků je fakt, že na základě tohoto popisu je možné automatizovaně ověřovat, zda implementace systému odpovídá jeho formálnímu popisu.

[1] F. Plášil, S. Višňovský: Behavior Protocols for Software Components, IEEE Transactions on Software Engineering, vol. 28, no. 11, Nov 2002

Konvergence a numerické nepřesnosti v iteračních metodách

Motivem vzniku všech uvedených prací, jejichž autory jsou Z. Strakoš, M. Rozložník a P. Tichý z Ústavu informatiky AV ČR, C.C. Paige z McGill University, Montreal a J. Liesen z Technische Universität, Berlin, byla analýza chování krylovovských metod, které hrají velmi podstatnou roli v současné výpočetní matematice. Práce [1] se věnuje metodě konjugovaných gradientů a ukazuje jak lze nejjednodušeji odhadnout chybu přibližného řešení. Článek vysvětluje hluboké souvislosti metody (zařazované mezi nejvýznamnější metodologické výsledky výpočetní matematiky 20. století) s klasickými součástmi matematické analýzy. Jsou v něm vyvráceny tradující se nesprávné názory na vliv zaokrouhlovacích chyb na chování metody a na posouzení její konvergence. Publikace [2]-[7] se zabývají podtřídou krylovovských metod minimalizujících reziduum. Jsou v nich ukázány překvapivé a zásadní souvislosti mezi rychlostí konvergence k hledanému řešení a ovlivněním výpočtu zaokrouhlovacími chybami. Jako vedlejší výsledek původního směru výzkumu vznikly práce [3], [4], [6] a [7], které přetvářejí základy teorie lineárního modelování úloh s nepřesnými daty.

Společným rysem uvedených prací je dosažení překvapivých a jednoduše formulovaných řešení (matematicky i technicky) obtížných problémů a využití souvislostí mezi zdánlivě vzdálenými oblastmi matematiky.

[1] Z. Strakoš and P. Tichý, *On Error Estimation in the Conjugate Gradient Method and Why It Works In Finite Precision Computations*, Electronic Transaction on Numerical Analysis (ETNA), 13, 2002, pp. 56-80.

[2] C.C. Paige and Z. Strakoš, *Residual and Backward Error Bounds in Minimum Residual Krylov Subspace Methods*, SIAM J. Sci. Comput., 23, 6, 2002, pp. 1898-1923.

[3] C.C. Paige and Z. Strakoš, *Bounds for the Least Squares Residual Using Scaled Total Least Squares*, In: Proceedings of the Third International Workshop on TLS and Errors-in-Variables Modeling, S. Van Huffel and P. Lemmerling (eds.), Kluwer Academic, Dordrecht, 2002, pp. 25-34.

[4] C.C. Paige and Z. Strakoš, *Unifying Least Squares, Total Least Squares and Data Least Squares Problems*, In: Proceedings of the Third International Workshop on TLS and Errors-in-Variables Modeling, S. Van Huffel and P. Lemmerling (eds.), Kluwer Academic, Dordrecht, 2002, pp. 35-44.

- [5] J. Liesen, M. Rozložník and Z. Strakoš, *Least Squares Residual and Minimal Residual Methods*, SIAM J. Sci. Comput., 23, 5, 2002, pp. 1503-1525.
- [6] C.C. Paige and Z. Strakoš, *Bounds for the Least Squares Distance using Scaled Total Least Squares Problems*, Numerische Mathematik, 91, 2002, pp. 93-115.
- [7] C.C. Paige and Z. Strakoš, *Scaled Total Least Squares Fundamentals*, Numerische Mathematik, 91, 2002, pp.117-146.

Soubor prací o dvou aplikabilních třídách matic

V práci [1] byl zaveden a vyšetřován nový pojem tzv. totálně nesingulární (obecně obdélníkové) matice (s prvky v nekomutativním okruhu s jednotkou), jejíž všechny tzv. relevantní podmatice jsou invertibilní. Ukazuje se, že každou totálně nesingulární matici lze, a to jednoznačně, faktorizovat v součin matic určitého typu (tzv. bidiagonálních, u nichž jen dvě sousední diagonály mohou mít nenulové prvky), které lze popsat soustavou několika určujících parametrů. Pomocí tohoto rozkladu lze snadno najít i inverzní matici čtvercové totálně nesingulární matice, která je po malé úpravě opět totálně nesingulární a lze ji tedy popsat určujícími parametry matice původní. Tato důležitá vlastnost může najít uplatnění v teorii kódování a dalších příbuzných oborech.

V těchto aplikacích je totiž obvykle podstatné najít poměrně jednoduché transformační vzorce, a přitom takové, že i vzorce pro zpětnou transformaci jsou jednoduché. Právě tato vlastnost je u totálně nesingulárních matic splněna.

Druhá vyšetřovaná třída matic je zobecněním třídy totálně pozitivních, totálně nezáporných a oscilačních matic, které se využívají v klasických aplikacích jako jsou mechanika malých kmitů a teoretická fyzika. Společná vlastnost matic z těchto tříd je, že kterýkoliv jejich subdeterminant je nezáporný (resp. u pozitivních matic kladný) a jejich zobecnění ([2], [3] a [4]) je založeno na tom, že jejich prvky obecně nejsou komutativní (záměnné). Nicméně i u těchto tříd podobně jako u třídy totálně nesingulárních matic lze dokázat faktorizaci v součin matic bidiagonálních a navíc byl nalezen rozklad třídy totálně nezáporných nesingulárních matic na uspořádané třídy se vzájemnými jednoduše propojenými vlastnostmi, které lze pak využít v jednotlivých aplikacích.

- [1] M. Fiedler, T. L. Markham, A factorization of totally nonsingular matrices over a ring with identity. *Linear Algebra Appl.*, 304 (2000), 161 – 171.
- [2] M. Fiedler, T. L. Markham, Generalized totally positive matrices. *Linear Algebra Appl.* 306 (2000), 87 – 102.
- [3] M. Fiedler, T. L. Markham, Generalized totally nonnegative matrices. *Linear Algebra Appl.* 345 (2002), 9 – 28.
- [4] S. Fallat, M. Fiedler, T. L. Markham, Generalized oscillatory matrices. *Linear Algebra Appl.* 359(1-3) (2003), 79 - 90.