

Главную особенность темы 1119 можно охарактеризовать просто как "*единство в многообразии*". Эта характеристика лучше всего иллюстрирует участие ученых ЛИТ в решении вычислительных задач, поставленных в более чем 40 научных проектах ОИЯИ.

Единство посредством *объединяющих принципов* исходит из существования общей математической основы всех этих проектов. Самое сильное требование, вытекающее из этой общей основы – это получение надежных решений в *быстро изменяющейся аппаратно – программной среде*.

В то время как численные, так и символьно-численные алгоритмы, разработанные для решения физических моделей, основываются на *дискретизации* области определения задачи, обеспечение *достоверности* численных решений опирается на дополнительные требования, помимо классического требования *стабильности*:

(i1) Дискретная схема должна *наследовать все алгебраические свойства* непрерывной математической модели. Наш прямой опыт показал, что это свойство наследования имеет огромное значение для решения *сильно нелинейных задач*.

(i2) Дискретная схема должна показать *нечувствительность* по отношению к аппроксимации бесконечного множества действительных чисел с помощью конечного набора чисел машины с плавающей запятой. Чаще всего, имплементация этой характеристики может требовать использование *масштаба-адаптированных алгоритмов*. Специфика мульти-масштабированного подхода сильно зависит от характера проблемы, описанной математической моделью.

(i3) *Вычислительная сложность* получаемых численных решений должна быть как можно ниже. Для получения алгоритмов пониженной сложности, которые характеризуются повышенной точностью и качеством, зачастую необходимо разрабатывать *новые принципы аппроксимации*. Разработка методов на основе этих принципов требует глубокую математическую культуру, талант, вдохновение, инновационное мышление.

(i4) *Развитие быстро меняющихся аппаратных средств*, характеризующееся с удивительной точностью известным *законом Мура* в течение более чем полувека, вызывает огромные трудности в осуществлении *долговечного* численного программного обеспечения. Последняя аппаратная революция, начавшаяся примерно десять лет назад, предложила кардинальное решение проблемы теплового порога, предотвращая дальнейшее увеличение тактовой частоты процессора: однопроцессорные чипы были полностью заменены на большое разнообразие конфигураций, состоящих из мульти-ядерных и/или многоядерных процессоров, графических ускорителей в сочетании с мульти-ядерными процессорами и т.д. В связи с этим радикальным изменением аппаратной части, известный Институт им. Гартнера (ИГ), специализирующийся на долгосрочных прогнозах в области информационных технологий (ИТ), подсчитал, что разработка и осуществление эффективных программ, способных полностью использовать эти аппаратные архитектуры, является одним из семи глобальных проблем, с которыми столкнутся ИТ в течение следующей четверти века. Огромное разнообразие фактических данных по этому направлению подтверждает, без исключения, правдивость предсказания ИГ.

Эти исключительные обстоятельства, определенные аппаратным обеспечением, выделяют *параллельные вычисления* как необходимость будущего развития ЛИТ-ОИЯИ, на основе различных парадигм программирования, осваиваемых персоналом ЛИТ. В этом отношении, гетерогенный вычислительный кластер HybriLIT (<http://hybrilit.jinr.ru/>), находящийся в стадии разработки в ЛИТ-ОИЯИ в качестве неотъемлемой части МИВК, является основным ресурсом для высокопроизводительных вычислений (ВПВ) в ОИЯИ.

4. Состояние исследований по заявленной научной проблеме (не более 1 стр.), включая литературный обзор (список литературы – на отдельной странице).

Основная мотивация продления темы 1119 на следующие три года, 2017-2019 гг., исходит из существующего опыта ОИЯИ, характеризующего симбиотической синергией между различными исследовательскими группами, охватывающего все лаборатории ОИЯИ и группы из ЛИТ. Первые ставят задачи для решения конкретных математических моделей,

возникающих в процессе выполнения своих научных проектов. Группы из ЛИТ вносят свой вклад в развитие математических методов, разработку алгоритмов и их внедрение в программное обеспечение, направленное на решение поставленных математических задач. Примеры такого сотрудничества приведены в этом предложении.

Здесь приводятся два ярких примера. Во-первых, постоянно обновляемый комплекс, состоящий из четырех пакетов программ, позволяет провести уникальный анализ широкого класса спектрометрических данных (в том числе вершин произвольных форм, 3D-данные). Он обеспечивает надежную и непревзойденную обработку данных Фурье-дифрактометра. Он широко используется в ОИЯИ (ЛНФ, ЛЯП), ПИЯФ в Гатчине, МГУ (химический факультет, ИЯФ МГУ) и др.

Второй пример – это моделирование тепловых рабочих режимов устройств генерирующих многозарядные молекулы для ионных источников, необходимых в различных технических установках (сотрудничество с ЛФВЭ).

Жизнеспособность такой схемы взаимодействия в значительной степени зависит от хороших отношений между координаторами групп двух сторон и, не в последнюю очередь, от решений руководства ОИЯИ и управлений лабораторий Института. С точки зрения всех заинтересованных сторон, эти отношения можно охарактеризовать как отличное, имеющие высокие шансы на развитие и плодотворное продолжение в будущем.

Одним из наибольших преимуществ этой схемы является ее *гибкость*: существующие профессиональные знания по математическим вычислениям часто вмещают несколько требований, одновременно исходящих от разных групп учёных ОИЯИ, следовательно, достигается общая гармонизация широкого спектра научных интересов, избегая, таким образом, потери от несогласованной разработки одной и той же научной проблемы.

Изучение библиотеки программного обеспечения, JINRLIB, поддерживаемой на [английском](#) и [русском](#) языках, предоставляет множество подтверждающих примеров. Так, один и тот же автор из ЛИТ (А.Г. Соловьев) вносил решающий вклад в создании 13 различных программных пакетов, используемых в трех лабораториях ОИЯИ (ЛНФ, ЛЯП, ЛФВЭ). Среди них, многократно обновленная программа [SAS](#) (версия 5.0.16, 23/02/2016) онлайн, а программа [FITTER](#) (версия 3.0.2, 04/04/2015), соответственно, офлайн обеспечивают информационно-вычислительную среду для обработки и анализа данных для наиболее востребованного ИБР-2 детектора ЮМО. Обновление ЮМО позиционно-чувствительными детекторами кардинально изменит дизайн и реализацию этих пакетов.

Другим не менее важным преимуществом является возможность *обобщения* решений, полученных на основе уже имеющихся общих экспертных и конкретных знаний, накопленных в ходе текущей работы в ЛИТ. Таким образом, зачастую достигается расширение пределов применимости математических методов, которые пригодятся в решении других, имеющих более широкую сферу применения, задач. Окончательным результатом является разработка оригинальных методов и подходов, не имеющих аналогов в мировой научной литературе.

Например, последовательное развитие, комбинирующее метод Канторовича, метод конечных элементов и асимптотические методы, привело в результате к сложному алгоритму, реализованному в серии [символьно-численных](#) и [численных](#) пакетах для исследования и моделирования малочастичных квантовых систем в ядерной и атомной физике. Разработанные алгоритмы и созданные программы позволяют решать с высокой точностью краевые задачи для многомерного уравнения Шредингера и для некоторых систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, вычислять соответствующие собственные значения и собственные функции, вычислять метастабильные и резонансные состояния, решать задачи рассеяния и туннелирования через отталкивающие барьеры. Эти пакеты программ, которые весьма полезны для широкого круга пользователей, были опубликованы в библиотеке программ CPC и в JINRLIB. Дальнейшие продолжения разрабатываются.

Особую роль в разработке параллельных алгоритмов и адаптации программных комплексов к современным вычислительным архитектурам играет гетерогенный кластер HybriLIT - активно развивающаяся компонента МИВК. Основными особенностями этой компоненты являются:

- (i) Многокомпонентная гетерогенная вычислительная структура, состоящая из вычислительных узлов, оснащенных новейшими ускорителями вычислений (NVIDIA GPU, Intel Xeon Phi), тенденции развития которых отражены в обновляемом два раза в год в [списке TOP 500](#), которые самых мощных суперкомпьютеров мира.
- (ii) Многокомпонентность кластера потребовала создания оригинальной концепции и новых подходов и системных решений для эффективного управления вычислительной системой, обеспечивающего выполнения требований *масштабируемости, эффективного использования вычислительных ресурсов и высокой отказоустойчивости.*
- (iii) Развиваемая архитектура кластера, с выбранными системными решениями позволяет расширять вычислительную компоненту кластера новейшими архитектурами доступными на рынке HPC, предоставляя пользователям возможность существенно ускорить проводимые исследования.
- (iv) Созданная и активно развиваемая информационно-вычислительная среда кластера HybriLIT обеспечивает информационную и организационную поддержку пользователей: веб-страница кластера HybriLIT (<http://hybrilit.jinr.ru/>), система Indico (<http://indico-hybrilit.jinr.ru>), сервис «HybriLIT user support» (<https://pm.jinr.ru/projects/hybrilit-user-support>), GitLab (<http://gitlab-hybrilit.jinr.ru>) – сервис, предназначенный для совместной разработки приложений.

Двухязычная поддержка на русском и английском языках всех веб-ресурсов отвечает потребностям ученых и специалистов из стран-участниц ОИЯИ.

В настоящее время HybriLIT можно охарактеризовать как масштабируемую высокопроизводительную вычислительную систему, обеспечивающую потребности широкого круга пользователей ОИЯИ и стран-участниц по трем основным направлениям в области высокопроизводительных вычислений: (а) разработка параллельных алгоритмов и создание комплексов программ, позволяющая проводить вычисления на современных HPC платформах; (б) использование адаптированных на новейшие вычислительные архитектуры программных комплексов и специализированных математических библиотек; (в) проведение массивно-параллельных и ресурсоемких расчетов.

5. Описание предлагаемого исследования (не более 3 стр.), включая планируемые к использованию методы.

Исследования, проводимые в рамках темы 1119, можно разделить на четыре основных этапа. Помимо двух руководителей темы, координаторами этой деятельности являются известные ученые ЛИТ, которые доказали свои лидерские качества.

- (1) Математические и численные методы для моделирования сложных физических систем.** Руководители: Адам Г., Пузынин И.В.
- (2) Программные комплексы и математические методы для анализа экспериментальных данных.** Руководители: Зрелов П.В., Иванов В.В.
- (3) Разработка численных методов, алгоритмов и программ, с использованием новых вычислительных технологий для многоядерных и гибридных архитектур.** Руководители: Адам Г., Зрелов П.В., Стрельцова О.И.
- (4) Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры.** Руководитель: Гердт В.П.

Существует тесная двойная связь между МИВК и темой 1119. Во-первых, МИВК традиционно обеспечивает вычислительные мощности для запуска, как последовательных кодов, так и классических параллельных кодов. Во-вторых, информационно-вычислительная

среда кластера HybriLIT, учебные курсы, позволяющие сгладить резкую кривую обучением на кластере HybriLIT, определяются молодой командой, вовлеченной в тему 1119.

В то время как деятельность (3) связана, в частности, с развитием и сопровождением информационно-вычислительной среды кластера HybriLIT, использование высокопроизводительных вычислительных ресурсов кластера HybriLIT может осуществляться в любой другой деятельности в рамках этой темы или какой-либо другой темы ОИЯИ и/или проектов. Таким образом, ссылка на кластер HybriLIT в этом смысле является законной и весьма желательной.

Результаты деятельности сотрудников ЛИТ в рамках темы 1119 являются двукратными. Одни состоят в *создании вычислительных средств*, другие - в *публикации научных статей*.

Вычислительные средства охватывают три основных направления, каждое из которых требует определенных способностей и опыта.

(а) Прямое решение задач, вытекающих из проектов, проводимых в ОИЯИ или при участии ОИЯИ, относится, как правило, к информационно-вычислительной поддержке различных экспериментов.

Поскольку *сбор данных в режиме онлайн* настроен на особенности устройства детектора, поддержка созданного программного обеспечения обязательно зависит от деталей детектора. Любое изменение конструкции детектора в обязательном порядке потребует новых усилий от персонала, обеспечивающего поддержку этого программного обеспечения. Как следствие, *поддержка программного обеспечения продолжается в течение всего срока эксперимента*. Нюанс практической значимости заключается в том, что предоставление поддержки программного обеспечения представляет собой *прерывающийся* процесс, который высвобождает в то же время энергию специалистов по программному обеспечению для других работ.

Эта модель взаимодействия общего значения, независимо от того, что речь идет о вышеупомянутом детекторе YUMO, или о крупномасштабных экспериментах (такие как ATLAS и CMS на БАК или CBM на FAIR).

Интересным примером является развитие программного обеспечения для микростриповых GEM камер эксперимента VM@N проекта NICA и разработка программного обеспечения катодно-стриповых камер (CSC) установки CMS. Опыт, ранее накопленный группой, возглавляемой В.В. Пальчиком, в развитии управляющего программного обеспечения для определения пространственного разрешения CSC, сильно помог в решении задач на VM@N. В то же время, работы по модернизации программного обеспечения для CSC, при их существенном изменении вместе со всей настройкой CMS во время останова БАК между сеансами RUN1 и RUN2, привели к существенно измененному подходу, который значительно улучшил качество реконструкции мюонов. Длительная процедура сертификации заканчивается, и это программное обеспечение в скором времени станет частью основного программного обеспечения для обработки данных эксперимента CMS. Будущий проект HL-LHC потребует внесения значительных изменений в установку CMS, включая и трек-сегменты CSC. Как следствие этого, необходимость дальнейших разработок программного обеспечения CSC будет востребовано.

(б) Программное обеспечение, разработанное для офлайн обработки и анализа данных, находится под двумя сильными факторами навязывая введение новых разработок.

Первый фактор, уже упомянутый в конце раздела 3., происходит от существования мультиядерных процессоров и либо многоядерных, либо графических ускорителей (GPU), требующих *распараллеливания* в качестве средства повышения эффективности вычислений.

Второй фактор исходит от изменений, на много порядков величины, параметров, при которых проводятся новые эксперименты. Тщательный анализ проведенный в ЛИТ, показал что, эвристические предположения, справедливые при более низких энергиях, которые вошли в программы созданные десятилетия назад и ставшие общим местом при

повторениях, являются ненадежными по параметрам новых экспериментов в физике высоких энергий. Как результат, ошибки в широко используемом генераторе Хиггинса Монте-Карло были устранены. Жизненно важные новые модули были разработаны для пакета Geant4 и были включены в новые выпуски 2010-2015 Geant4. [Нынешний статус Geant4](#) был определен с важным соавторством В. В. Ужинского (ЛИТ). Дальнейший вклад сотрудников ЛИТ в развитие Geant4 и монтекарловское моделирование последует.

(в) Наконец, мы должны добавить к этому неполному перечислению *решение сложных математических задач*, до сих пор противостоящих предыдущим попыткам получить гарантированный результат с контролируемой точностью.

Качество результатов, полученных в рамках престижных международных сотрудничеств, лучше всего иллюстрируется *четырьмя премиями ОИЯИ* за 2014-2016 гг. (за предыдущий календарный год), полученными командами, включая персонал ЛИТ, в сильной конкуренции, в которой участвуют все лаборатории ОИЯИ:

- Г. Адам, С. Адам (ЛИТ) [плюс четыре других автора] Первая премия (2013) за теорию спиновых флуктуаций и высокотемпературной сверхпроводимости в купратах;

- И. Амирханов (ЛИТ) [плюс семь других авторов] Вторая премия (2013) за реализацию режима работы циклотрона АИС-144 (Польша) для протонной терапии меланомы глаза;

- О. Чулуунбаатар, А. Гусев, В. П. Гердт, В. А. Ростовцев (ЛИТ) [плюс шесть других авторов] Вторая премия (2015) за проблемно-ориентированный комплекс программ для решения краевых задач динамики малочастичных квантовых систем;

- И.Л. Боголюбовский (ЛИТ) [плюс пять других авторов] Вторая премия (2015) за решеточные исследование глюонных и призрачных пропагаторов калибровки Ландау в квантовую хромодинамику.

Ю. Калиновский и О. Григорян (ЛИТ) [плюс ещё семь авторов] получили две награды за 2014 год за цикл работ «Исследование фазовой диаграммы КХД и средств диагностики обнаружения фазового переход деконфайнмента на основе структуры адронов и их реакций»: малый приз *Международной академической издательской компании Наука/Интерпериодика* и за *Лучшую Публикацию* в журнале Письма в ЭЧАЯ.

Лауреаты Премии Губернатора Московской области в сфере науки и инноваций для молодых ученых: - А. Айрян (2014 г.) и О. Дереновская (2015 г.).

Университет «Дубна» присвоил звание Почетного профессора нашему уважаемому коллеге Г. А. Ососкову (ЛИТ) в 2014 году.

Итог *научных публикаций* персонала ЛИТ, в рамках темы 1119 в течение последних трех лет, указывает на 339 соавторства касающиеся проекта CMS и других 284 статей, опубликованных в реферируемых журналах; 66 статей в научных сборниках и периодических изданиях; 33 приглашенных доклада и 91 устных доклад на международных конференциях; 58 электронных публикаций. Список избранных статей сотрудников отдела вычислительной физики (НОВФ) ЛИТ, которые предоставляют подавляющее большинство этих публикаций, приведен в приложении.

(1) Математические и численные методы для моделирования сложных физических систем

Математические и численные методы для моделирования сложных физических систем: развитие и использование математических и компьютерных методов для моделирования новых экспериментальных установок, ускорительных комплексов и их элементов, ядерно-физических процессов, сложных физических систем, разработка параллельных алгоритмов и комплексов программ на современных многопроцессорных вычислительных системах, включая кластер HybriLIT, для уточнения моделей, исследования возможностей их совместного использования и сравнения с экспериментальными данными.

• Построение компьютерных 3D моделей дипольных и квадрупольных магнитов NICA (ОИЯИ) и SIS100 (GSI); вычисление распределений магнитного поля в рабочих областях

магнитов является неотъемлемыми частями процесса сертификация вновь построенных магнитных модулей в ЛВЭ.

- Исследование математических моделей сложных физических процессов в рамках квантово-полевых и молекулярно-динамических уравнений.

- Развитие математических моделей для описания свойств ядерной материи при энергиях NICA, компьютерное моделирование поведения критических точек на фазовой диаграмме КХД.

- Исследование применимости методов фрактального анализа для обработки и систематизации результатов молекулярно-динамического моделирования взаимодействия пучков нанокластеров с тонкими металлическими пленками.

- Создание математических моделей образования димезоатомов в процессах множественного рождения частиц при высоких энергиях, в том числе когерентного рождения долгоживущих nP состояний $\pi^+\pi^-$ атомов.

- Разработка новых и развитие существующих численных методов для эффективного учета особенностей физических процессов и их математических моделей: нелинейности, многопараметричности, существования критических режимов и фазовых переходов.

- Численное исследование свойств бозе-конденсированных систем с нелокальными потенциалами взаимодействия.

- Развитие методов численного исследования локализованных структур и бифуркационных режимов в нелинейных моделях физики конденсированных состояний.

- Численное решение краевой задачи для нелинейного уравнения Больцмана-Пуассона, описывающего взаимодействие макромолекул белка с растворителем.

- Моделирование механизмов различных ядерно-физических процессов в рамках микроскопической модели оптического потенциала, включая предравновесные процессы в реакциях $(p,\alpha)^{59}\text{Co}$ при энергиях от 65 до 160 МэВ, процессы развала при взаимодействиях изотопов бора и других экзотических ядер с протонами и ядрами, неупругие взаимодействия пионов с ядрами при энергиях в области (33)-резонанса.

- Исследование моделей астрофизики направлены на приспособление результатов новых экспериментов.

- Разработка новых математических методов для извлечения значимой информации из данных, получаемых в экспериментах, проводимых с участием ОИЯИ;

- Развитие и поддержка программы первичной обработки SAS для спектрометра ЮМО реактора ИБР-2. Реализация возможности обработки ею данных с ПЧД для изотропно рассеивающих образцов.

- Будущее развитие сверхпроводниковых многоцелевых изохронных циклотронов требует математическое моделирование динамики пучков для многоцелевых изохронных циклотронов и реализацию быстрых пакетов, позволяющих численные эксперименты, востребованные конструированием таких установок.

- Обобщение предыдущих методов к масштабируемым адаптированным алгоритмам уменьшенной вычислительной сложности.

- Обобщение метода базисных элементов (МБЭ), определено на трехточечной сетке, позволяющее использование полиномов высокой степени для интерполяции функций и сглаживания данных к многомерным задачам с помощью параметрических функциональных представлений.

- Разработка МБЭ-алгоритмов и программ для интеллектуального анализа и прогнозирования параметров реактора ИБР-2М (флуктуации энергий импульсов, расход жидкого натрия через активную зону и др.).

- Байесовская автоматическая адаптивная квадратура, с зависящие от масштаба квадратурные суммы, приводящая в нечувствительность выхода от конечной длины мантиисы.

(2) Программные комплексы и математические методы для анализа экспериментальных данных

Программные комплексы и математические методы для анализа экспериментальных данных: разработка новых математических методов для извлечения значимой информации из данных, получаемых в экспериментах, проводимых в ОИЯИ и с участием ОИЯИ; алгоритмы и комплексы программ для решения задач в физике высоких энергий, ядерной физике, физике конденсированных сред, физике радиационной биологии, в том числе на ускорительных комплексах LHC, NICA, FAIR, а также экспериментальных установках нейтринной программы ОИЯИ.

Существуют три класса задач ОИЯИ, решенные с прямым участием ЛИТ.

- Разработка математических методов, алгоритмов и программного обеспечения для надежного моделирования и интерпретации экспериментальных данных

- Разработка и сопровождение глауберовской Монте-Карло программы и адаптация модели FTF пакета Geant4 для экспериментов NICA/MPD и CBM.

- Разработка нейросетевых приложений для выполнения анализа нелинейных главных компонент и для изображения кластеризация с помощью нейронных сетей глубокого обучения.

- Обработка и анализ данных экспериментов НУКЛОН и КОМБАС.

- Развитие методов автоматического анализа гамма-спектров и программного обеспечения для автоматической калибровки гамма-спектров в условиях малой статистики.

- Разработка и адаптация методов анализа данных к условиям малой статистики и неполноты наблюдения (оценка периодов полураспада).

- Развитие математических методов анализа экспериментальных данных малоуглового нейтронного и синхротронного рассеяния на основе обобщенного метода разделенных формфакторов для получения новой информации о везикулярных полидисперсных наносистемах.

- Разработка методов и алгоритмов для проведения массивных вычислений электростатических потенциалов молекул ДНК, РНК и белковых факторов, а также карт поверхности указанных биополимеров. Расчет электростатических потенциалов и карт поверхности молекул биополимеров для решения задач биомолекулярного узнавания на кластере HybriLIT.

- Генерация случайных шероховатых поверхностей для моделирования особенностей дифракции при отражении нейтронов от поверхности наноструктурированных объектов.

- Программная и информационная поддержка проектов ОИЯИ

- Разработка системы управления потоками данных в экспериментах проекта НИКА.

- Разработка программного обеспечения для трекового GEM детектора, входящего в состав детекторного комплекса эксперимента VM@N (разработка алгоритмов и комплекса программ для моделирования и обработки данных с микростриповой GEM камеры; разработка и программная реализация алгоритмов восстановления пространственных координат точек взаимодействия заряженных частиц с регистрирующими элементами GEM детектора; программная реализация моделей GEM детектора для актуальных конфигураций, запланированных в предстоящих сеансах эксперимента VM@N).

- Реконструкция физических событий в эксперименте VM@N на данных 2016-2019 гг., полученных с Нуклотрона; разработка алгоритмов и программ для распознавания траекторий частиц в установке MPD.

- Развитие программного обеспечения VMRIA для автоматического анализа больших массивов спектров, измеряемых в экспериментах на ФДВР на ИБР-2.

- Программная и информационная поддержка крупномасштабных экспериментов, проводимых с участием ОИЯИ

- Поддержка программного обеспечения эксперимента ATLAS (поддержка разработанных в ЛИТ компонент системы сбора и обработки информации; новые развития:

создание панелей инструментов для мониторинга сетей ATLAS; создание новой версии Log Manager online системы TDAQ ATLAS).

- Улучшение локальной реконструкции в катодно-стриповых камерах эксперимента CMS на данных БАК с большой светимостью.

- Программное обеспечение эксперимента CBM: разработка различных алгоритмов (в том числе векторизации и распараллеливания) по распознаванию и реконструкции траекторий заряженных частиц для различных детекторов установки CBM (MVD, STS, MUCH, RICH); разработка критериев отбора и алгоритмов распознавания и реконструкции редких распадов; разработка, оптимизация и тестирование алгоритмов обработки событий для системы FLES; разработка комплекса системы баз данных для эксперимента CBM.

(3) Разработка численных методов, алгоритмов и программ, с использованием новых вычислительных технологий для многоядерных и гибридных архитектур

Этот этап темы направлен на развитие численных методов, алгоритмов и комплексов программ, разрабатываемых на основе технологий параллельного программирования предназначенных для эффективного использования многоядерных и гибридных архитектур с целью решения ресурсоемких задач теоретической и экспериментальной физики. Также одним из направлений является поддержка решения прикладных инженерно-физических задач с использованием пакетов программ, как уже адаптированных под параллельные вычисления, например, COMSOL Multiphysics, CATIA-GDML geometry builder, EPOCH, так и создание параллельных реализаций вновь разрабатываемых программных комплексов в том числе:

- для численного исследования многомерных моделей, базирующихся на эволюционных уравнениях;
- для решения уравнений движения молекулярной динамики;
- для вычисления многократных интегралов при исследовании процессов ионизации атома гелия, многоатомных молекул и ионов.
- для решения задач квантовой механики и исследования бозонных систем на основе программного комплекса MCTDHB;
- для обработки и анализа данных спектрометра ЮМО на реакторе ИБР-2 (параллельная версия программы Fitter).
- для оптимизация отдельных программ пакета ROOT;

В рамках этого этапа предполагается создание параллельных версий программ библиотеки JINRLIB представляющий наибольший интерес для пользователей ОИЯИ.

(4) Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры

Этот этап предусматривает развитие методов компьютерной алгебры для численного решения дифференциальных уравнений и моделирования квантовых информационных процессов; создание алгоритмов и комплексов программ символьно-численного решения задач, возникающих в экспериментальных и теоретических исследованиях, с использованием новейших вычислительных аппаратных ресурсов, включая гетерогенный кластер HybriLIT.

• Развитие в области компьютерной алгебры методов моделирования квантовых систем и квантовых информационных процессов:

- Разработка и исследование новой модели квантовых сетей с функцией памяти.
- Описание сепарабельных и перепутанных X-состояний пары двух кубитов.
- Учёт релятивистских поправок в описании динамики спиновых частиц в сильном лазерном поле (для проекта ELI-NP, Румыния).
- Разработка комбинаторных алгоритмов и алгоритмов статистического моделирования квантовых систем на основе унитарных представлений конечных групп.

• Development of computer algebra methods with application to symbolic-numerical solution of differential equations

- Создание комплекса символьно-численных программ для описания динамики низко-размерных мало-частичных квантовых систем на основе метода конечных элементов с присоединёнными полиномами Эрмита. Адаптация разработанных алгоритмов и программ для гибридных архитектур.

- Алгоритмическое построение разностных схем, наследующих основные алгебраические свойства исходных дифференциальных уравнений.

- Разработка алгоритмов, запрашиваемых специальными темами

- Вычисление констант ренормировки пропагатора смешивания кварков в двух-петлевом приближении

- Развитие рекурсивных методов вычисления Фейнмановских интегралов и их применение для вычисления одно- и двухпетлевых радиационных поправок.

- Развитие различных методов получения функциональных уравнений для Фейнмановских интегралов и их применение для аналитического продолжения Фейнмановских интегралов как функций кинематических переменных.

- Разработка и реализация алгоритмов вычисления вибрационно-ротационных базисных функций в пространстве параметров, описывающих квадрупольные и октупольные деформации сферических ядер.

- Разработка и внедрение специальных компьютерных средств

- Реализация системы компьютерной алгебры Reduce, Axiom, Maxima на Lucid Common Lisp с интерфейсом к библиотекам численных программ.

6. Кадровые ресурсы (не более 1 стр.).

По сравнению с предыдущими предложениями на 2014-2016 гг. по теме 1119, значительный шаг вперед в настоящем предложении по продлению данной темы является явное номинирование главных сотрудников (лидеры групп) из других лабораторий ОИЯИ, роль которых является существенной в определении конкретных задач, а также в интерпретации результатов. Сильное взаимодействие с командой МИВК подчеркнуто в этапе номер 3.

Основные этапы темы:

Этап темы	Руководители
Лаборатория или другие подразделения ОИЯИ	Основные исполнители
1. Математические и численные методы для моделирования сложных физических систем	Адам Г. Пузынин И.В.
ЛИТ	Адам С., Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., Амирханов И.В., Барашенков И.В., Башашин М.В., Боголюбский И.Л., Войчеховски А.Э. Волохова А.В., Воскресенская О.О., Григорян О., Дикусар Н.Д., Земляная Е.В., Калиновский Ю.Л., Карамышева Т.В., Кулябов Д.С., Лукьянов К.В., Лыу Д.В.А., Махалдиани Н.В., Мачавариани А., Михайлова Т.И., Мусульманбеков Ж.Ж., Никонов Э.Г., Ососков Г.А., Подгайный Д.В., Полякова Р.В., Пузынина Т.П., Робук В.Н., Саха Б., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Старченко Ю.Б., Стрельцова О.И., Ширикова Н.Ю., Юкалова Е.П., Ямалеев Р.М.

ЛФВЭ	Геворгян С.Р., Донец Е.Е., Капишин М.Н., Кечечян А.О., Никитин В.А., Рогачевский О.В., Ходжибагиян Г.Г., Шейнаст В.
ЛТФ	Виницкий С.И., Воронов В.В., Гнатич М., Джолос Р.В., Ильгенфриц Е.-М., Лукьянов В.К., Тонеев В.Д., Фризен А.В., Юкалов В.И.
ЛЯР	Артюх А.Г., Кочнев М.К., Лукьянов С.М., Пенионжкевич Ю.Э., Рымжанов Р.А., Середа Ю.М., Скуратов В.А.
ЛНФ	Белушкин А.В., Корепенова Н., Кушлин А.И., Иваньков А.И., Маношин С.А., Пепельшев Ю.Н., Соловьев Д.В.
ЛЯП	Афанасьев Л.Г., Карамышева Г.А., Киян И.Н.

2. Программные комплексы и математические методы для анализа экспериментальных данных

Зрелов П.В.
Иванов В.В.

ЛИТ	Аблязимов Т.О., Акишина В.П., Акишина Е.П., Александров Е.И., Александров И.Н., Баранов Д.А., Белогуров С.Г., Войтишин Н.Н., Дереновская О.Ю., Жабицкая Е.И., Земляная Е.В., Злоказов В.Б., Казаков А.А., Казымов А.И., Кисель П.И., Козлов Г.Е., Костенко Б.Ф., Круглова Л.Ю., Кухтина И.Н., Лебедев А.А., Минеев М.А., Михайлова Т.И., Овчаренко Е.В., Ососков Г.А., Пальчик В.В., Рихвицкий В.С., Слепнев С.К., Соснин А.Н., Степаненко В.А., Сюракшина Л.А., Ужинский В.В., Шигаев В.Н., Яковлев А.В.
ЛФВЭ	Галоян А.С., Герценбергер К.В., Капишин М.Н., Ладыгин В.П., Ленивенко В.В., Малахов А.И., Мовчан С.А., Рогачевский О.В., Сапожников М.Г., Топилин Н.Д.
ЛЯР	Артюх А.Г., Пенионжкевич Ю.Э., Середа Ю.М., Соболев Ю.Г., Утенков В.К., Фомичев А.С., Цыганов Ю.С.
ЛНФ	Балагуров А.М., Бобриков И.А., Киселев М.А., Козленко Д.П., Фронтасьева М.В.
ЛЯП	Бедняков В.А., Алексеев Г.Д., Бедняков И.В., Жемчугов А.С., Ольшевский А.Г., Понтекорово Д.Б.
УНЦ	Пакуляк С.З.

3. Разработка численных методов, алгоритмов и программ, с использованием новых вычислительных технологий

Адам Г.
Зрелов П.В.
Стрельцова О.И.

для многоядерных и гибридных архитектур.

ЛИТ

Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., Александров Е.И., Амирханов И.В., Башашин М.В., Беляков Д.В., Волохова А.В., Жабицкая Е.И., Земляная Е.В., Зуев М.И., Киракосян М.Х., Матвеев М.А., Подгайный Д.В., Пузынина Т.П., Сапожников А.А., Сапожникова Т.Ф., Саркар Н.Р., Сархатов И., Сердюкова С.И., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Торосян Ш.Г., Тухлиев З.К., Шарипов З.А., Червяков А.М., Чулуунбаатар О., Юлдашев О.И., Юлдашева М.Б.

ЛИТ-МИВК

Кореньков В.В., Мицын В.В., Стриж Т.А.

ЛЯР

Апель П.Ю., Скуратов В.А.

ЛТФ

Блашке Д.Б., Булычев А.А., Попов Ю.В., Шукринов Ю.М.

4. Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры

Гердт В.П.

ЛИТ

Абгарян В., Боголюбская А.А., Гусев А.А., Евлахов С.А., Корняк В.В., Рапортиренко А.М., Рогожин И.А., Тарасов О.В., Торосян А.Г., Чулуунбаатар О., Хведелидзе А.М., Юкалова Е.П., Янович Д.А.

ЛТФ

Виницкий С.И., Чижов А.В., Титов А.И., Физиев П., Юкалов В.И.

ЛЯР

Гикал Б.Н.

7. Бюджет проекта (не более 1 стр.).

В тыс. долл.

	Наименование статей бюджета	Сметная стоимость 2017-2019	В том числе по годам:		
			2017	2018	2019
1	2	3	4	5	6
1	Заработная плата	4073.8	1279.6	1356.4	1437.8
2	Единый социальный налог	1230.2	386.4	409.6	434.2
3	Соцбытфонд	264.8	83.2	88.2	93.4
4	Расходы по международному сотрудничеству	179.1	59.7	59.7	59.7
	а) командирование в страны-участницы	60.3	20.1	20.1	20.1
	б) командирование в страны-неучастницы	53.4	17.8	17.8	17.8
	в) командирование на территории России	20.4	6.8	6.8	6.8

	г) прием иноспециалистов	25.5	8.5	8.5	8.5
	д) проведение совещаний, предст.расходы	19.5	6.5	6.5	6.5
5	Материалы	36.0	10.0	12.0	14.0
6	Оборудование	282.7	92.7	94.0	96.0
7	Потребление электроэнергии	-	-	-	-
8	Потребление тепловой энергии и водоснабжение	-	-	-	-
9	Оплата пуско-наладочных работ	-	-	-	-
10	Оплата услуг научно-исследовательских организаций	-	-	-	-
11	Научно-информационное обеспечение	-	-	-	-
15	Оплата услуг связи	-	-	-	-
	ИТОГО	6066.6	1911.6	2019.9	2135.1

8. Краткий SWOT-анализ. В пунктах 3–7 должны быть четко указаны основные преимущества и недостатки проекта/темы по каждому из подпунктов.

• Сильные стороны темы 1119

- Среди исполнителей темы 24 с докторскими званиями (3 – в 2010-2013 гг.) и 47 – с кандидатскими (11 – в 2010-2016 гг.), персонал темы 1119 имеет очень высокую научную квалификацию.

- Наличие в ЛИТ диссертационного совета (ДС) Д720 001.004 (с 11 сотрудниками ЛИТ из 20 членов).

ДС определяет и поддерживает качество на высоком уровне (со 100% утверждением своих предыдущих предложений). Это, бесспорно, заслуга членов Совета, в первую очередь, его председателя, В. В. Иванова, что обретение научного звания в ДС – это настоящая школа овладения компетенции, требуемой для умелого научного мышления и для выражения научной мысли на ясном профессиональном языке.

- Старший персонал обладает знаниями высокого научного класса, нажитыми упорным трудом.

- Честное высказывание мнений - это плюс.

- Наличие разнообразных форм и средств для повышения квалификации сотрудников, в особенности – молодых (учебные курсы, учебные пособия, отраслевые конференции и семинары для молодых ученых и специалистов, групповые и индивидуальные консультации, научные семинары и т. д.).

- Периодические конференции и семинары, организуемые ЛИТ в рамках темы 1119.

В том числе – международные конференции ММСР (Математическое моделирование и вычислительная физика), которые проводятся раз в два года и получили солидную международную репутацию. К этому привели публикации Трудов конференций ММСР при жёстком реферировании рукописей (редакторы Г. Адам, Я. Буша, М. Гнатич). Труды ММСР 2011 года были опубликованы изданием Шпрингер ([том LNCS 7125](#)) в 2012 году (это стало настоящим бестселлером по данным маркетинговых отчетов Шпрингера). Труды ММСР 2015 были опубликованы в известной серии EPJ Web of Conferences ([том 108, 2016](#)).

Следующая конференция ММСР 2017 будет проходить 3-7 июля 2017 г., в ЛИТ-ОИЯИ, планируется принести несколько интересных нововведений: значительное расширение секции по математическому моделированию в биологии; организация двух параллельных школ по математическому моделированию – одна по широкому кругу задач физики высоких энергий, другая – по моделированию для проекта NICA (с целью внести свой вклад в преодоление разрыва по привлечению опытных специалистов в численные исследования

задач NISA). Уже традиционное обучение по параллельным и гетерогенным вычислениям будет способствовать сокращению недостатка навыков работы на кластере HуbriLIT.

• **Слабые стороны темы 1119**

- *Профессиональная мобильность* зрелых ученых, как правило, более низкая по сравнению с внешними ожиданиями.

Основной фактор – это слишком быстрые темпы развития программно-аппаратной среды. Возникновение нескольких крупных изменений вычислительных парадигм за последние три десятилетия было довольно трудно освоить.

Ученые старшего поколения не перешли в основную на сегодня парадигму объектно-ориентированного программирования. Это затрудняет их работу с современными пакетами и создает сложности в руководстве работой молодых ученых.

Однако это только одна сторона медали.

- Глубина *математической подготовки* молодых ученых довольно низка. У выпускников ВУЗов сегодня зачастую нет твердого знания многих разделов прикладной математики и численного анализа вместе с базовым пониманием физических явлений и моделей. Этот первоначальный недостаток можно постепенно преодолеть путем кропотливой работы над конкретными задачами. Все средства, о которых говорилось в “Сильной стороне”, вносят свой вклад в стимуляции этого процесса.

Существует, однако, эмпирический факт, который заслуживает рассмотрения.

- *Высокий процент неудач* попыток молодых людей развивать успешную карьеру в области компьютерной математики и вычислительной физики. Только сильные характеры способны пройти тест на выносливость, требуемый усвоение мастерства в этой области.

Часто эта трудность связана с разрывом в уровне зарплат: люди, работающие в ИТ-бизнесе, получают значительно более высокую заработную плату по тем интеллектуальным усилиям, которые соответствует их уровню образования.

Однако, конец этого процесса выбора - это личности, которые уважают свою работу и которые хотят стать все более и более искусными в своих занятиях.

Сотрудничество по теме:



Страна или международная организация	Город	Институт или лаборатория	Участники	Статус
Азербайджан	Баку	ИФ НАНА	Мамедов Н.	Совместные работы
Армения	Ереван	ННЛА	Ананикян Н. Оганесян К.	Совместные работы
		ЕГУ	Чубарян Э.	Совместные работы
		РАУ	Саркисян А.А.	Совместные работы
Беларусь	Минск Гомель	ИПИА НАН РА	Геворкян А.С.	Совместные работы
		ИМ НАНБ	Янович Л.Я. + 3 чел.	Совместные работы
		ГГТУ	Цитринов А.В. + 3 чел.	Совместный проект
Болгария	София	IMI BAS	Колковска Н.	Совместные работы
		INRNE BAS	Богданова Н. + 1 чел. Гайдаров М. Димитрова С. Кадрев Д. Купенова Т.Н.	Совместные работы Совместные работы

		SU	Младенов Д. Димова С. + 2 чел. Черногорова Т.П. Христов И.Г. Христова Р.Д.	Совместные работы
Вьетнам	Пловдив	PU	Атанасова П.Х.	Совместные работы
	Ханой	VNU	Нгуен Ван Хьеу + 2 чел. Во Чонг Тхак	Совместные работы
Грузия	Тбилиси	ГГУ	Ломидзе И.	Совместные работы
		ТГУ	Георгадзе Г.	Совместные работы
		ГУ	Гогилидзе С.	Совместные работы
Казахстан	Алматы	ИЯФ	Красовицкий П.М.	Совместные работы
Молдова	Кишинев	ИПФ АНМ	Палий Ю.Г.	Совместные работы
Монголия	Улан-Батор	NUM	Жанлав Т. Будням С.	Совместные работы
		MUST	Батгэрэл Б.	Совместные работы
Польша	Варшава	WUT	Словински Б. Плута Я.	Совместные работы
	Вроцлав	UW	Блашке Д.+3 чел.	Совместные работы
	Краков	NINP PAS	Суликовский Я.	Совместные работы
	Люблин	UMCS	Гоздз А.	Совместные работы
	Отвоцк-Сверк	NCBJ	Полянски А. Шута М. Сандач А. Собичевски А. Словински Б.	Совместные работы
Россия	Москва	ИПМ РАН	Вабищевич П.Н. Калиткин Н.Н. Поляков С.В. Повещенко Ю.А.	Договор
		ИОФ РАН	Егоров А.А.	Совместные работы
		ИПМех РАН	Алгазин С.Д. Ильин А.С.	Совместные работы
		ИПУ РАН	Постнов С.С.	Договор
		ИТЭФ	Захаров В.И. Борняков В. Брагута В.	Совместные работы
		МГУ	Кузаков К.А.	Совместные работы
		НИВЦ МГУ	Воеводин В.В.	Совместные работы
		НИЦ КИ	Иванов Ю.Б.	Совместные работы
НИЯУ "МИФИ"	Воскресенский Д.Н. + 1 чел. Кудряшов Н.А. Крянев А.В. Климанов В.А.	Совместные работы		

		НИИЯФ МГУ РУДН	Кузаков К.А. Севастьянов Л.А. + 2 чел. Рыбаков Ю.П.	Совместные работы Совместные работы	
	Гатчина	ПИЯФ	Ханзадеев А.В.	Совместные работы	
	Дубна	Ун-т "Дубна"	Крюков Ю.А.	Совместные работы	
	Протвино	ИФВЭ	Борняков В. Брагута В. Битюков С.И. + 2 чел.	Совместные работы	
	Пушино	ИМПБ РАН ИТЭБ РАН ИБ РАН	Лахно В.Д. Полозов Р.В. + 3 чел. Чиргадзе Ю.Н.	Совместные работы Совместные работы Совместные работы	
	С.-Петербург	НИИЭФА	Сычевский С.Е. Ламзин Е.А. Кухтин В.П.	Совместные работы	
	Саратов	СГУ	Блинков Ю.А. + 1 чел. Дербов В.Л.	Совместные работы	
	Томск	ТГУ	Скорик Н.А. Южакова Ю.В.	Совместные работы	
Румыния	Бухарест	IFIN-НН	Замфир Н.В. Дулеа М. + 6 чел. Исар А. + 2 чел. Ангел Д. Висинеску М.	Гранты и проекты в рамках программы «Хулубей- Мещеряков»	
			IFA	Бузату Ф.	Совместные работы
			ISS	Стан Й. Севченко А.	Совместные работы
	Клуж-Напока	UB INCDTIM	Штефанеску Д. Бот А. Алмасан В. Фаркас Ф. Вароди К. Флоаре К. Белеан Б. Труска Р. Альберт С. Бенде А.	Протокол Проект в рамках программы «Хулубей- Мещеряков»	
Словакия	Банска Бистрица	UMB	Коломейцев Е.	Совместные работы	
	Кошице	IEP SAS	Вала М.	Совместные работы	
		TUKE	Буша Я. + 2 чел. Покорны И. Прибиш Я. Вальова Л.	Совместные работы	
		PJSU	Торок Ч.	Совместные работы	

			Семаниш Г.	
	Прешов	PU	Павлуш М. + 1 чел.	Протокол
Чехия	Прага	CTU	Броулим Я.	Совместные работы
Германия	Бонн	UniBonn	Вебер А.	Совместные работы
	Вупперталь	UW	Камперт К.-Х.	Совместные работы
	Гамбург	Ун-т	Книль Б.А.	Совместные работы
	Гейдельберг	Ун-т	Стрельцов А.И.	Совместные работы
	Гессен	JLU	Хёне К.	Совместные работы
	Дармштадт	GSI	Зенгер П. Зенгер А. Васильев Ю.О. Шайденбергер К. Муха И. Киселев О. Мюллер Ф. Фишер Э. Фризе В.	Совместные работы
	Дрезден	IFW	Ван ден Бринк Й. Хозои Л.	Совместные работы
	Йена	Ун-т	Штернбек А.	Совместные работы
	Кассель	Uni Kassel	Зайлер В.М.	Совместные работы
	Марбург	Ун-т	Брандт Р.	Совместные работы
	Мюнхен	LMU	Вольтер Х.	Совместные работы
	Фрайберг	TUBAF	Лейбинг С.	Совместные работы
	Франкфурт/М	Ун-т	Кисель И.В. Линденштрут В.	Совместные работы
Италия	Турин	INFN	Балестра Ф. Пираджино Г.	Совместные работы
	Бари	UniBa	Ла Скала Р.	Совместные работы
	Фраскати	INFN LNF	Датоли Дж.	Совместные работы
ЮАР	Кейптаун	UCT	Алексеева Н.	Соглашение
	Претория	UP	Энгельбрехт А. + 1 чел.	Соглашение
	Стелленбос	SU	Коули А.	Соглашение
Австралия	Сидней	Ун-т	Реза Хашеми-Нежад	Совместные работы
Бельгия	Брюссель	ULB	Карпов Е.А.	Совместные работы
	Льеж	ULg	Куньон Ж. Кудель Ж.Р. Лансберг Ж.П.	Совместные работы
Бразилия	Сан-Карлос	IFSC USP	Багнато В.С.	Совместные работы
Греция	Салоники	AUTH	Антониоу Я. Костакостос К.	Совместные работы
Канада	Торонто	IBM Lab	Абрашкевич А.	Совместные работы
	Эдмонтон	U of A	Сафухи Х.	Совместные работы

Индия	Калькутта	JU	Рахаман Ф.	Совместные работы
Китай	Ханчжоу	ZJU	Шао-Кай Луо	Совместные работы
Португалия	Лиссабон	UL	Конотоп В. Зезюлин Д.	Совместные работы
США	Аргонн	ANL	Гохар Ю.	Совместные работы
	Стэнфорд	SU	Михелс Д.	Совместные работы
Таджикистан	Душанбе	TNU	Абдулоев Х. + 3 чел. Рахимов Ф.	Совместные работы
		ФТИ АН РТ	Муминов Х.Х. Хохлов А.Х.	Совместные работы
	Худжанд	XGU	Додожонов Е.Д. Мулложонов М.М. Муртазаев Х. Музафаров Д.З.	Совместные работы
Тайвань	Тайбэй	AS	Чин Кун Ху Айрян Ш.	Совместные работы
Франция	Нанси	UL	Джулакян Б.Б.	Совместные работы
	Нант	SUBATECH	Тиоллье Н.	Совместные работы
ЦЕРН	Женева	ЦЕРН	Христов П. Аволио Дж. Астигаррага Е. Рибон А. + 5 чел. Балларино А. Жианнелли С.	Совместные работы
Швейцария	Цюрих	ETH	Сорнетт Д.	Совместные работы
Япония	Осака	Kansai Univ.	Кук Н.Д.	Совместные работы