

Предложение о продлении темы 1119 на 2020–2023

- 1. Название темы.** 05-6-1119-2014/2023, «Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных»

Приоритет: 1 Статус: Продлена

Руководители темы: Адам Георге, Зрелов Петр Валентинович

Заместители: Буша Ян, Чулуунбаатар Очбадрах

Дата первого утверждения темы: 2014

Участвующие лаборатории ОИЯИ: ЛИТ, ЛФВЭ, ЛТФ, ЛНФ, ЛЯП, ЛЯР, ЛРБ, УНЦ

Участвующие страны и международные организации:

Армения, Беларусь, Бельгия, Болгария, Бразилия, Вьетнам, Германия, Греция, Грузия, Израиль, Италия, Казахстан, Канада, Китай, Молдова, Монголия, Польша, Россия, Румыния, Словакия, США, Таджикистан, Франция, ЦЕРН, Чехия, Швейцария, ЮАР, Япония.

- 2. Краткая аннотация темы (не более 300 слов).**

Проведение основополагающих перспективных и опережающих исследований в области вычислительной математики и физики, нацеленных на создание новых математических методов, алгоритмов и программ для решения актуальных задач, возникающих в ходе научных исследований в области экспериментальной и теоретической физики. Эти задачи связаны с широким спектром проводимых в рамках научных проектов, утвержденных для выполнения в течение семилетнего периода 2017–2023 гг. в ОИЯИ исследований в физике высоких энергий, ядерной физике, физике конденсированных сред и наноструктур, биофизике и информационных технологиях, решение которых неотделимо от использования вычислительной техники. Такими вопросами первостепенной важности в ОИЯИ являются проект NICA, нейтринная программа, физика сверхтяжелых и экзотических ядер, нейтронные исследования. Численные или символьно-численные вычисления будут выполняться на Многофункциональном информационно-вычислительном комплексе (МИВК), в первую очередь на гетерогенной вычислительной платформе HybriLIT (включающей в себя учебно-тестовый полигон и суперкомпьютер «ГОВОРУН») и создаваемой распределенной инфраструктуре Больших данных. В состав исследовательских коллективов входят как опытные ученые с выдающимися научными достижениями, так и увлеченные молодые ученые и инженеры. Запрашиваемое финансирование будет покрывать заработную плату, участие в научных конференциях, научные поездки и приобретение минимального количества персональных компьютеров и лицензий в рамках утвержденных ресурсов для ЛИТ-ОИЯИ. Отличительной особенностью исследований темы является тесное сотрудничество ЛИТ со всеми лабораториями Института, а также с институтами стран-участниц ОИЯИ.

- 3. Введение (не более 1 стр., здесь и далее – 12pt, интервал 1), включающее описание научной проблемы, ее актуальность и план выполнения темы.**

Отличительной чертой подавляющей части научных проектов, утвержденных для выполнения в течение семилетнего периода 2017–2023 гг. в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ) (<http://www.jinr.ru/roadmap/>) является необходимость решения широкого спектра вычислительных задач все возрастающей сложности. Значительное увеличение мощности высокопроизводительных вычислений (ВПВ) в связи с введением в эксплуатацию гетерогенного суперкомпьютера «ГОВОРУН» расширяет сферу доступной вычислительной сложности численных и символьно-численных задач, решаемых в ЛИТ в рамках базовых направлений научных исследований ОИЯИ.

Продление Темы 1119, предложенное на четырехлетний период 2020–2023 гг. мотивировано главным образом текущими потребностями в ходе реализации наиболее важных проектов ОИЯИ в течение семилетнего периода 2017–2023 гг. (NICA, Baikal GVD, создание сверхтяжелых ядер).

Деятельность, выполненную в рамках Темы 1119, можно и впредь охарактеризовать как *единство в разнообразии*. Активное участие ученых ЛИТ в более чем 40 научных проектах ОИЯИ указывает на разнообразии решаемых задач.

Единство посредством *объединяющих принципов* достигается благодаря присутствию *общей математической основы* всех этих проектов. Основным требованием, вытекающим из этой общей основы, является получение *надежных* решений в рамках *быстро развивающейся аппаратно-программной среды*.

В то время как численные и символьно-численные алгоритмы, разработанные для решения физических задач, основываются на *дискретизации* их области определения, обеспечение *достоверности* численных результатов опирается, помимо классического требования *устойчивости*, на дополнительные требования:

- (а) Дискретная схема должна *унаследовать все алгебраические свойства* непрерывной математической модели. Это свойство наследования имеет решающее значение для *решения сильно нелинейных задач*.
- (б) Дискретная схема должна быть *нечувствительна* к аппроксимации действительных чисел с бесконечным числом знаков с помощью конечных наборов знаков машинных чисел с плавающей запятой. Как правило, реализация этого требования требует развития многомасштабных адаптивных алгоритмов. Многомасштабность существенно зависит от особенностей задачи, описываемой математической моделью.
- (в) *Вычислительная сложность* получаемых численных решений должна быть минимально допустимой. Чтобы создать алгоритмы низкой сложности, которые в то же время характеризуются повышенной точностью и качеством, зачастую необходимо разрабатывать *новые принципы аппроксимации*. Разработка новых методов на основе таких принципов требует глубокой математической культуры, таланта, вдохновения и инновационного мышления.

Для обеспечения достоверности статистического анализа *редких событий* (происходящих, например, при производстве сверхтяжелых ядер или при идентификации крошечной доли полезной информации, присутствующей в накопленных *больших данных*), требуются новые методы и подходы, которые отсутствовали в предыдущих количественных моделях.

Внедрение *долговечного* численного программного обеспечения сильно затруднено из-за *быстро меняющейся аппаратной среды*. Последняя аппаратная революция, начавшаяся около полутора десятилетий назад, привела к замене *однопроцессорных* микросхем множеством *мульти-ядерных* (или *многоядерных*) процессоров, *графических ускорителей* в сочетании с мульти-ядерными процессорами и т. д. В связи с этим радикальным изменением аппаратного обеспечения известный Институт Гартнера (GI), специализирующийся на долгосрочных прогнозах в области информационных технологий (ИТ), оценил, что разработка и внедрение *эффективного программного обеспечения*, способного в полной мере использовать параллельные вычислительные архитектуры, ожидается не ранее конца следующего десятилетия. Огромное разнообразие отчетов в этом направлении подтверждает достоверность прогноза GI.

Эти исключительные обстоятельства, обусловленные особенностями современной компьютерной техники, выделяют *параллельные вычисления* в качестве наиболее необходимого будущего направления разработок ЛИТ-ОИЯИ на основе различных парадигм программирования, осваиваемых персоналом ЛИТ. В этом отношении гетерогенная вычислительная платформа HybriLIT (<http://hlit.jinr.ru/en>) является основным ресурсом для ВПВ в ОИЯИ.

В настоящее время во всем мире все большее значение придается созданию систем обработки и анализа Больших данных, машинного обучения и искусственного интеллекта для решения задач естественных наук. В числе наиболее актуальных и передовых направлений находится создание решений для объединения технологий Больших данных с технологиями высокопроизводительных вычислений. Это позволяет на качественно новом

уровне решать определенные классы задач на разных этапах проведения физического эксперимента – от моделирования детектора и системы хранения и анализа данных до реконструкции событий, физического анализа, мониторинга функционирования детекторов и предсказания возможных нештатных ситуаций, изучения распространения тематической научной информации и т.д.

Еще одним вызовом, с которым придется столкнуться в ближайшем будущем, являются *квантовые вычисления*, реализация которых потребует принципиально нового подхода к философии вычислений.

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

Основной подход к продлению темы 1119 в течение следующих четырех лет, 2020–2023 гг., основан на существующих традициях исследований ОИЯИ, характеризующихся симбиотической синергией между различными исследовательскими группами, охватывающей все лаборатории ОИЯИ и группы из ЛИТ. Первые ставят задачи для численного решения в рамках конкретных математических моделей, возникающих в процессе выполнения своих научных проектов. Группы ЛИТ вносят свой вклад в развитие математических методов, разработку алгоритмов и их внедрение в программное обеспечение, направленное на решение поставленных математических задач. Случаи такого сотрудничества приведены в настоящем предложении.

Жизнеспособность такой схемы взаимодействия в значительной степени зависит от хороших взаимоотношений координаторов групп с обеих сторон и, что не менее важно, от решений руководства ОИЯИ и лабораторий института. С точки зрения всех заинтересованных сторон, эти отношения можно охарактеризовать как отличные, с самыми высокими шансами на улучшение и плодотворное продолжение в будущем.

Одним из наибольших преимуществ этой схемы является ее *гибкость*: существующий в ЛИТ опыт в области математических вычислений часто учитывает *несколько* требований, одновременно исходящих от разных групп ОИЯИ, и, следовательно, достигается общая гармонизация широкого круга научных интересов, что позволяет избежать потерь, связанных с несогласованными дублирующимися разработками одной и той же научной проблемы.

Даже при наличии отличных человеческих отношений, при совместной работе на пути к успеху встречаются подводные камни, которые необходимо выявить и преодолеть.

В идеале, сотрудник, работающий в теме 1119, должен иметь многогранный опыт в нескольких отдаленных друг от друга областях.

(а) Он должен *думать как ученый – информатик*, от которого предполагается искусное владение несколькими современными методами программирования, что является необходимым условием для успешной реализации численных и/или символьно-численных пакетов ВПВ на современных суперкомпьютерах, таких как «ГОВОРУН».

(б) *Глубокие математические знания и опыт* требуются для правильной формулировки рассматриваемых проблем, независимо от их происхождения в экспериментальной или теоретической физике, для правильного определения их особенностей, таких как корректность, для смелого продвижения в Terra Incognita *Больших данных*.

(в) *Высокий уровень образования в численном анализе* необходим, чтобы успешно справляться с задачами высокой вычислительной сложности, избегать ошибок, возникающих при работе с машинными числами вместо действительных/комплексных чисел заложенных в основе непрерывных математических моделей.

(г) *Основательное понимание физических аспектов* задач позволяет правильно оценить порядки различных величин, входящих в исследуемые явления, и правильно использовать принцип Вейсса при формулировке иерархически упорядоченных численных приближений.

Собрать команду, отвечающую всем этим требованиям – сложная задача. Кроме того, разнообразие задач, которые необходимо решить, порождает дополнительные конкретные вопросы. Наиболее важные из них кратко обсуждаются ниже.

- *Программная поддержка научного эксперимента распространяется на весь жизненный цикл эксперимента.* Хотя существует заранее определенная программа предстоящей работы, существует множество факторов, которые требуют обновления вспомогательного программного обеспечения для данного эксперимента. Несколько примеров, упомянутых ниже, кратко иллюстрируют различные изменяющиеся обстоятельства.

(1) С добавлением позиционно-чувствительных детекторов к установке ЮМО, наиболее часто используемой детекторной установке на реакторе ИБР-2М, задача автоматизации сбора и анализа данных посредством разработки программного обеспечения для первичной обработки данных вступила в новую фазу. Эта задача была частично решена в последние годы для случая изотропного рассеяния. Случай анизотропного рассеяния, на несколько порядков сложнее, является открытой задачей, которая должна быть решена в настоящем предложении.

(2) Работа, выполняемая на нескольких дифрактометрах ИБР-2М (например, на Фурье-дифрактометре высокого разрешения (ФДВР)), включает эксперименты по изучению необратимых процессов, в ходе которых спектроскопические данные быстро меняются. Совсем недавно был поднят вопрос о максимально возможной автоматизации обработки данных (интерактивное определение исходных данных, визуализация полученных данных и т. д.) в разных условиях таких экспериментов.

(3) Участие в решении технических задач обеспечивающих высокоточную работу время-проекционной камеры (TRC), которая является основным трековым детектором установки MPD на ускорителе NICA. Разработка лазерной калибровочной системы для контроля скорости дрейфа и учета искажений электрического поля, необходимая для мониторинга производительности TRC. Реализация системы и ее развитие будут иметь большое значение в течение всего срока действия эксперимента MPD/NICA.

(4) Измерения, выполняемые на установке BM@N при меняющихся конфигурациях детекторов разных рабочих сеансов, требуют максимально адаптированного программного обеспечения, способного оперативно учитывать возникающие изменения.

(5) Периодическое обновление больших детекторов (ATLAS, ALICE, CMS, LHCb) во время отключений LHC требует соответствующего обновления/модификации программного обеспечения. Команда LIT лучше всего подходит для разработки программной поддержки и обслуживания модуля CSC установки CMS.

(6) Уникальные всемирно признанные открытия новых сверхтяжелых элементов, которые завершили 7-й период периодической таблицы Менделеева, будут реализованы в более широком масштабе в течение следующих четырех лет. Анализ будущих результатов ЛЯР в этой области и сопоставление с работами конкурирующих групп потребует дальнейших теоретических исследований, касающихся, в том числе, надежной оценки периода полураспада ядра и сечений реакции радиоактивных ядер при небольшой статистике.

- *Наличие мощных вычислительных инструментов с различными вариантами поддержки параллелизма (гетерогенный суперкомпьютер «ГОВОРУН») открывает возможности развития новых методов исследования, касающихся анализа данных или крупномасштабных вычислительных экспериментов.*

(а) Анализ данных, основанный на проектировании глубоких нейронных сетей, был недавно успешно начат в ЛИТ-ОИЯИ в связи с несколькими проектами, направленными на надежное распознавание образов при (слегка) меняющихся обстоятельствах. Продолжение таких исследований очень многообещающе: наличие достаточных ресурсов для начального периода *глубокого машинного обучения* приведет к непревзойденной эффективности использования таких алгоритмов на стадии прогнозирования.

(б) Уже упомянутая *аналитика Больших данных*, связанная с проведением крупномасштабных экспериментов, станет новым направлением исследований, которое требует освоения новых способов мышления.

(в) Последний пример необычного использования суперкомпьютера «ГОВОРУН» касается проведения крупномасштабных численных экспериментов. Этот вид деятельности, основанный на Меморандуме о взаимопонимании, подписанном в ноябре 2018 года в Бухаресте и предусматривающем взаимную поддержку проектов NICA и ELI-NP, показал, что запуск очень больших пакетов на суперкомпьютере является проблемой беспрецедентной сложности. Реализация пакета PConGPU на суперкомпьютере «ГОВОРУН» направлена на понимание и изучение явлений, связанных с ускорением элементарных частиц с помощью лазера, что должно привести к революционным изменениям принципов, управляющих созданием будущих новых ускорителей. В то время как доступный пакет PConGPU был разработан для графических ускорителей CUDA, его запуск на суперкомпьютере «ГОВОРУН» остро поднимает проблему его оптимизации на тензорных графических ускорителях Volta 100.

• Хотя основная часть деятельности в течение следующих четырех лет будет посвящена созданию, обслуживанию и обновлению программных средств, поддерживающих ведущие эксперименты ОИЯИ, *будет также предпринят ряд независимых разработок* с целью выявления принципиально новых подходов к решению новых задач или существующих, но еще не решенных. Предполагается, что в долгосрочной перспективе такие исследования обеспечат уникальные новые вычислительные инструменты, прежде всего для научных исследований, проводимых в ОИЯИ.

Мы должны упомянуть квантовую информатику и квантовые вычисления как возможную альтернативу обработке больших объемов данных, которые, как ожидается, будут накапливаться в будущих экспериментах NICA (MPD, SPD).

Новые эффективные алгоритмы крайне необходимы для уже существующих задач в рамках альтернативных подходов: исследования молекулярной динамики, основанные на новых принципах разработки кода, новых расширениях метода трехэлементных базисных элементов для решения задач сглаживания, интерполяции или экстраполяции, достаточно точные решения связанных и квази-связанных состояний или состояний рассеяния в задачах нескольких тел, многоступенчатое многомасштабное решение интегралов для теоретических расчетов наблюдаемых характеристик и т. д.

• Наконец упомянем не менее важную библиотеку программного обеспечения JINRLIB, поддерживаемую как на [английском](#), так и на [русском](#) языках. JINRLIB будет и впредь играть важную роль в обеспечении удобного доступа пользователей к тщательно протестированным кодам (особенно параллельным кодам) и к руководствам по надлежащей практике подготовки параллельных программ.

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 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., Буша Я., 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 для многоядерных и гибридных архитектур и аналитика Больших данных.** Руководители: Адам Г., Чулуунбаатар О., Стрельцова О.И., Кореньков В.В., Зрелов П.В.
- (4) Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений.** Руководитель: Гердт В.П.

Существует тесная связь между темой 1119 и развитием информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ, выполненной в рамках темы 05-6-1118-2014/2023, и ее проектом развития МИВК. С одной стороны, МИВК обеспечивает вычислительные мощности для запуска как последовательных, так и параллельных программ. С другой стороны, команда, вовлеченная в тему 1119, является основным разработчиком новых компьютерных пакетов в ОИЯИ и поддержки существующих. Даже профессиональное использование внешних (открытых или лицензионных) программ само по себе требует творческой работы для их настройки (адаптации) к задачам, которые должны решаться в институте, и для повышения их эффективности на гетерогенной платформе HybriLIT (кластер HybriLIT и суперкомпьютер «ГОВОРУН»).

Результаты работы 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, выполняемых 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*. Деталь, имеющая практическое значение, заключается в том, что предоставление поддержки программного обеспечения является *прерывистым* процессом, который позволяет направить энергию специалистов по программному обеспечению на другие цели. Пять примеров, представленных в этапе 4, иллюстрируют эти идеи.

(б) Программное обеспечение, разработанное для офлайн обработки и анализа данных, находится под влиянием двух существенных факторов, требующих внедрения новых разработок.

Первый фактор, уже упомянутый в конце раздела 3, связан с мульти-ядерной (многоядерной) структурой процессоров либо с наличием графических ускорителей (GPU), что требует применения *распараллеливания* в качестве средства повышения эффективности вычислений.

Второй фактор вызван изменениями, 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 общепринятыми, 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 включены в новые выпуски 2010–2017 Geant4. [Последний крупный пересмотр пакета Geant4](#) был сделан с существенным вкладом В.В. Ужинского (ЛИТ).

(в) Наконец, мы должны добавить к этому неполному перечислению *решение сложных математических задач*, для которых до сих пор не удается получить гарантированный результат с контролируемой точностью.

Качество таких результатов, полученных в рамках престижных международных сотрудничеств, лучше всего иллюстрируется следующими примерами:

- Избрание О. Чулуунбаатара действительным членом Монгольской академии наук в 2018 г. на основании научных результатов, полученных в ЛИТ ОИЯИ;

- Официальное утверждение (в течение 2017 года) обновления программного обеспечения катодно-стриповых камер (CSC) установки CMS (реализовано В. Пальчиком и Н. Войтишиным) в качестве стандартного модуля реконструкции мюонов;

- Достигнуто существенное развитие моделей QGS и FTF пакета Geant4. Эти модели включены в преимущественный физик-лист, используемый всеми коллаборациями LHC. (В.В. Ужинский);

- Работа В.П. Гердта и др. на симпозиуме по символьным и алгебраическим преобразованиям (ISSAC 2017) была признана лучшей и удостоена приза Association for Computing Machinery (ACM) (<http://www.issac-conference.org/2017/awards.php>);

- Поощрительная премия ОИЯИ за 2017 год: «Определение времени высвечивания сцинтилляторов и изучение пространственной корреляции ядерного излучения автокорреляционным методом». Авторы: В.А. Морозов, Н.В. Морозова, В.Б. Злоказов.

- Адиабатическое представление атомных димеров и тримеров в коллинеарных конфигурациях реализовано в очень эффективном численном пакете, который смог точно дать асимптотические разложения базисных функций, эффективные потенциалы, фундаментальные решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка и соответствующие асимптотические состояния рассеяния, а также резонансное рассеяние, метастабильные и связанные состояния. (А.А. Gusev, S.I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar et al., Ядерная физика, 2018, Том 81, № 6, сс. 911–936)

В числе *научных публикаций* с авторством и соавторством сотрудников ЛИТ в рамках темы 1119 в течение последних трех лет – 205 работ, касающихся проекта CMS и 294 статьи по другим темам, опубликованных в реферируемых журналах; 33 статьи в научных сборниках и периодических изданиях; 35 приглашенных докладов и 111 устных презентаций на международных конференциях; 63 электронных публикации. Список избранных статей приведен в отчете по теме за 2017–2019 годы.

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

Этот этап включает разработку и использование математических и вычислительных методов для моделирования новых экспериментальных установок, ускорительных комплексов и их элементов, ядерно-физических процессов, сложных физических систем. 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. Уточнение моделей, исследование возможностей их использования и сравнение с экспериментальными данными будут проводиться в основном за счет разработки параллельных алгоритмов и их реализации в программных пакетах, настроенных на использование современных аппаратных архитектур, в первую очередь – гетерогенной вычислительной платформы HybriLIT.

- Расчеты магнитных полей для разных установок:

- Трёхмерное компьютерное моделирование магнитных систем в рамках проектов NICA(ОИЯИ) и FAIR(GSI). Вычисление необходимых характеристик магнитного поля в рабочих областях магнитов.

- Создание быстрых конечно-элементных алгоритмов для трёхмерных вычислений распределения магнитных полей и их реализация в пакете COMSOL Multiphysics.

- Разработка методов и алгоритмов эффективного высокоточного трёхмерного моделирования магнитов и проведение вычислений, нацеленных на создание сверхпроводящих циклотронов для протонной терапии, в сотрудничестве с ЛЯП.

- Оптимизация программ динамики пучка в циклотронах с целью увеличения скорости, эффективности и точности расчетов.

- Исследование математических моделей сложных физических процессов будет продолжено в рамках квантово-полевого и молекулярно-динамического подходов:

- Развитие математических моделей для описания свойств ядерной материи при энергиях NICA:

(а) Обобщение модели Намбу – Иона -Лазинио с петлей Полякова и численный анализ поведения масс и констант связи кварков, дикварков, мезонов и нуклонов при конечной температуре и плотностях;

(б) Завершение построения модели численного решения гидродинамических уравнений с использованием новых уравнений состояния и объединение ее с кинетическим описанием начального состояния и состоянием после замораживания;

(в) Моделирование специфических свойств уравнений состояния, в частности, зависимости физических величин от напряженности магнитных полей при малых температурах и больших значениях химического потенциала;

(г) Анализ, на базе гибридной модели с использованием разработанных кодов, объединяющих свойства кинетического и гидродинамического подходов, имеющихся экспериментальных данных по столкновению тяжелых ионов в области энергий строящегося ускорителя NICA.

- Разработка новых алгоритмов молекулярной динамики, направленных на повышение точности и значительное сокращение времени вычислений.

- Развитие моделей взаимодействия пучков ионов с мишенями с целью объяснения разных эффектов: дальнодействие и описание структурных изменений материалов при облучении тяжелыми ионами и нанокластерами, нахождение пороговых значений энергопотерь в облучаемых материалах, приводящих к структурным изменениям и сквозным трекам в тонких мишенях.

- Разработка математических моделей, алгоритмов и программ для исследования локально неравновесных процессов воздействия сверхкоротких лазерных импульсов на материалы. Формулировка и решение систем уравнений теплопроводности для исследования лазерной абляции, проведение численных экспериментов в рамках молекулярной динамики. Проверка правильности теоретических моделей путем сравнения полученных численных результатов с экспериментальными данными.

• Разработка новых и развитие существующих численных методов для эффективного учета особенностей физических процессов:

- Разработка численных методов для описания равновесных и неравновесных свойств мезоскопических систем атомов в ловушках.

- Численное исследование оптических и самоорганизующихся атомных решеток с акцентом на управление их свойств внешними полями. Развитие оптимизированной теории возмущений и теории автомодельных приближений для этих систем.

- Исследование нелинейных многопараметрических процессов в сложных физических системах с внешними воздействиями, включая модели сверхпроводящих структур, локализованные состояния в конденсированных средах, моделирование газогидродинамических процессов в пористых средах.

- Численное исследование ядерно-физических процессов на основе гибридной модели микроскопического потенциала, включая реакции с легкими экзотическими ядрами.

- Развитие методов моделирования отражения нейтронов от слоистых наноструктур. Исследования магнитных пленок как структур, состоящих из векторных микрообъектов.

- Исследование моделей черных дыр и червоточин, как в астрофизике, так и в космологии, направленное на объяснение результатов новых экспериментов.

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

- Группа малоуглового рассеяния нейтронов, ЛНФ (спектрометр ЮМО реактора ИБР-2):

(а) Сопровождение программы первичной обработки SAS для спектрометра ЮМО;

(б) Развитие программы для работы с ПЧД для изотропно и для анизотропно рассеивающих образцов и кольцевых детекторов;

(в) Разработка и поддержка параллельной версии программы Fitter.

- По проекту БАЙКАЛ, ЛЯП: Поэтапное создание alert системы.
- Моделирование электромагнитных каскадных ливней в области сверхвысоких энергий и численное исследование их характеристик по экспериментальным данным, полученным в таких астрофизических проектах как IceCube, Antares, Байкал.
 - Разработка надежных масштабно-адаптированных алгоритмов пониженной вычислительной сложности:
 - Разработка метода экстраполяции шестого порядка с целью повышения эффективности алгоритмов для численного решения широкого спектра задач.
 - Развитие методики и алгоритмов для обработки и анализа нейтронных шумов реактора ИБР-2М.
 - Многоступенчатый многомасштабный подход к Байесовской автоматической адаптивной квадратуре.
 - Разработка алгоритмов численного моделирования эволюции жидкого кристалла в импульсном электрическом поле, а также под влиянием ориентирующей структурированной поверхности.
 - Моделирование особенностей поглощения-эмиссии и фотонной плотности состояний холестерического жидкого кристалла с изотропным дефектом внутри.
 - Квантово-химический кластерный подход к электронным системам с сильным спин-орбитальным взаимодействием.
 - Проведение вычислений электромагнитных и термальных величин, характеризующих физические процессы в сверхпроводниках MgB_2 .

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

Этот этап включает разработку и использование математических и вычислительных методов для извлечения значимой информации из данных, получаемых в экспериментах, проводимых в ОИЯИ или 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. Разработка алгоритмов нейронных сетей глубокого обучения станет важной частью этого этапа.

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

- Разработка математических методов, алгоритмов и программного обеспечения для надежного моделирования и интерпретации экспериментальных данных:
 - В рамках пакета Geant4: моделирование рождения очарованных частиц и их транспорт в веществе; улучшение алгоритма расчета энергий при возбуждении ядер-остатков и улучшение описания образования ядерных фрагментов; усовершенствование моделей FTF и QGSM и их применение для моделирования условий различных экспериментов (PANDA, NICA/MPD, NICA/SPD).
 - Развитие программного обеспечения, обработка и анализ данных экспериментов НУКЛОН и КОМБАС.
 - Анализ структуры и свойств везикулярных систем фосфолипидов и препаратов на основе фосфолипидной транспортной наносистемы по данным малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей в зависимости от внешних факторов и химического состава.
 - Разработка алгоритмов нейронных сетей глубокого обучения:
 - Развитие платформы анализа и управления данными биологического мониторинга для контроля и прогнозирования состояния окружающей среды.
 - Разработка математических методов для выявления тонкой структуры в распределениях продуктов ядерных реакций по массе и энергии.

- Разработка программного средства для реконструкции треков элементарных частиц на основе методов глубокого обучения при обработке экспериментальной информации с современных трековых детекторов физики высоких энергий.

- Программная и информационная поддержка проектов ОИЯИ:

- Совершенствование информационных систем для онлайн и офлайн обработки данных экспериментальных установок комплекса NICA: Разработка баз данных для задач экспериментов VM@N и MPD.

- Программная поддержка эксперимента VM@N: Разработка и реализация алгоритмов моделирования, обработки и анализа данных для трековой системы эксперимента VM@N, состоящей из газовых и полупроводниковых детекторов с микростриповым съемом информации (GEM, SILICON, CSC) и их последующая интеграция в среду BMNRoot.

- Развитие и доработка модели DQGSM путем сравнения с экспериментальными данными VM@N.

- В работах по эксперименту VM@N:

- (а) Реконструкция траекторий заряженных частиц во внешних трековых детекторах: многопроволочные пропорциональные камеры, кремниевые детекторы, катодно-стриповые камеры, дрейфовые камеры, газовые электронные умножители;

- (б) Идентификация частиц во время-пролетном детекторе TOF700;

- (в) Поиск странных гиперонов на данных с Нуклотрона.

- В работах по эксперименту MPD: Участие в реализации лазерной калибровочной системы для юстировки время-проекционной камеры (TPC), контроля скорости дрейфа и учета искажений электрического поля внутри TPC как части экспериментальной установки MPD.

- Дальнейшее развитие статистических методов для анализа данных эксперимента при условиях их малой статистики и неполноты наблюдения изучаемых процессов: проверка правдоподобия гипотез, построение оценок параметров периода полураспада ядра и сечения реакции и точности этих оценок, фильтрация помех и построение оптимальной схемы эксперимента.

- Развитие пакетной обработки нейтронных дифракционных спектров, измеренных в режиме in situ в реальном времени (ФДВР на ИБР-2, ЛНФ).

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

- Поддержка программного обеспечения эксперимента ATLAS: (а) Развитие и сопровождение настройки и управления ATLAS TDAQ; (б) Развитие и поддержка модулей проекта EventIndex; (в) Развитие модулей проекта Condition DB (в рамках подготовки к RUN3).

- В работах по эксперименту CMS:

- (а) Разработка, тестирование и внедрение в официальное программное обеспечение CMS алгоритмов разделения перекрывающихся сигналов и построения трек-сегментов в катодно-стриповых камерах (CSC);

- (б) Оценка пространственного разрешения и эффективности CSC на экспериментальных данных с БАК;

- (в) Изучение эффектов «старения» CSC на тестовом мюонном пучке с облучением радиационным источником (CERN-GIF++);

- (г) Оценка фоновых загрузок в CSC на экспериментальных данных с БАК.

- В работах по эксперименту CBM:

- (а) Развитие методов отбора редких процессов: разработка моделей, методов, алгоритмов и программного обеспечения;

- (б) Развитие и поддержка комплекса баз данных.

(3) Разработка численных методов, алгоритмов и программ для многоядерных и гибридных архитектур и аналитика Больших данных

А. Разработки для многоядерных и гибридных архитектур

Этот этап темы направлен на развитие численных методов, алгоритмов и комплексов программ, разрабатываемых на основе технологий параллельного программирования при помощи OpenMP, MPI, CUDA/OpenCL, методов машинного обучения и глубокого обучения (ML/DL), предназначенных для эффективного использования многоядерных и гибридных архитектур с целью решения массивно-параллельных, ресурсоемких задач теоретической и экспериментальной физики. Разрабатываемые методы и алгоритмы будут учитывать тенденции развития вычислительных архитектур и IT-технологий, позволяющих реализовать необходимую функциональность для разнообразных высокопроизводительных вычислительных средств и существенно ускорить решение широкого спектра задач, стоящих перед ОИЯИ.

Для обеспечения возможностей разработки математических моделей и алгоритмов и проведения ресурсоемких расчетов, в том числе на графических ускорителях, позволяющих существенно сокращать время вычислений, в рамках гетерогенной вычислительной платформы HybriLIT создана и активно развивается экосистема для анализа данных и также для задач ML/DL. Созданная экосистема включает две компоненты: первая предназначена для проведения ресурсоемких, массивно-параллельных задач обучения нейронных сетей с использованием графических ускорителей NVIDIA (Рис. 1а); вторая предназначена для разработки моделей и алгоритмов на базе JupyterHub –многопользовательской платформы по работе с Jupyter Notebook (Рис. 1б).

- На базе созданной экосистемы предполагается развивать алгоритмы на основе ML/DL:
 - на основе рекуррентных и свёрточных нейронных сетей с глубоким обучением для решения задач быстрого распознавания множественных треков в экспериментах физики частиц, в том числе для мегапроекта NICA и нейтринной программы;
 - на базе нейросетевого подхода для задач анализа и классификации медицинских и биологических данных.

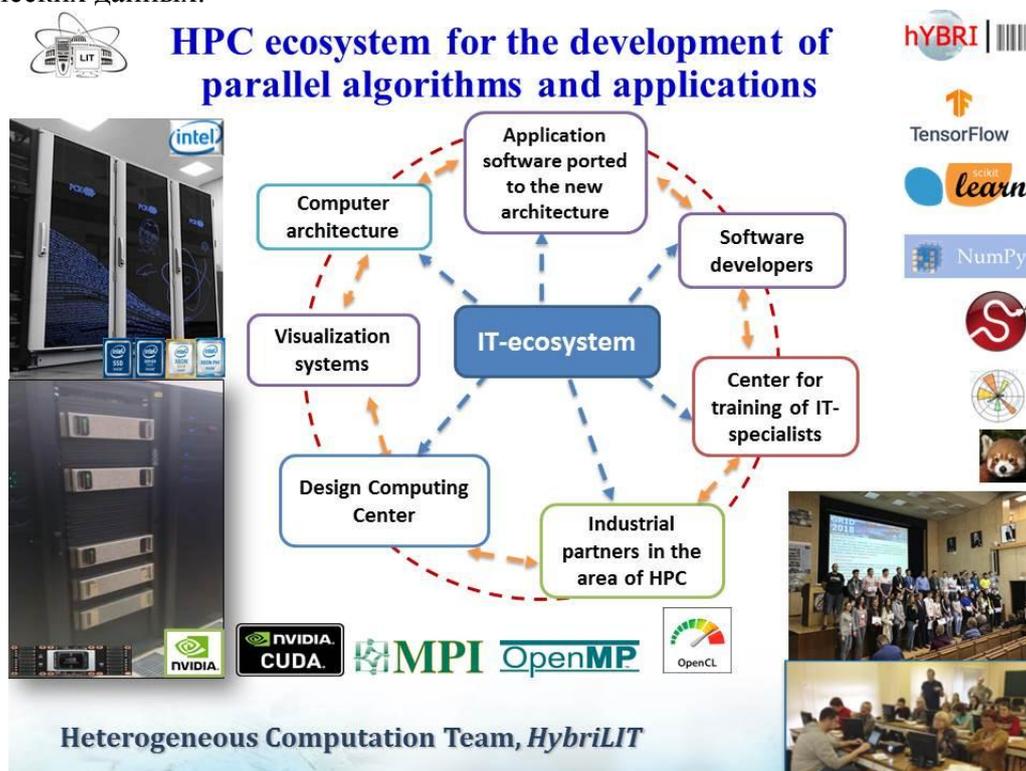


Рис. 1а

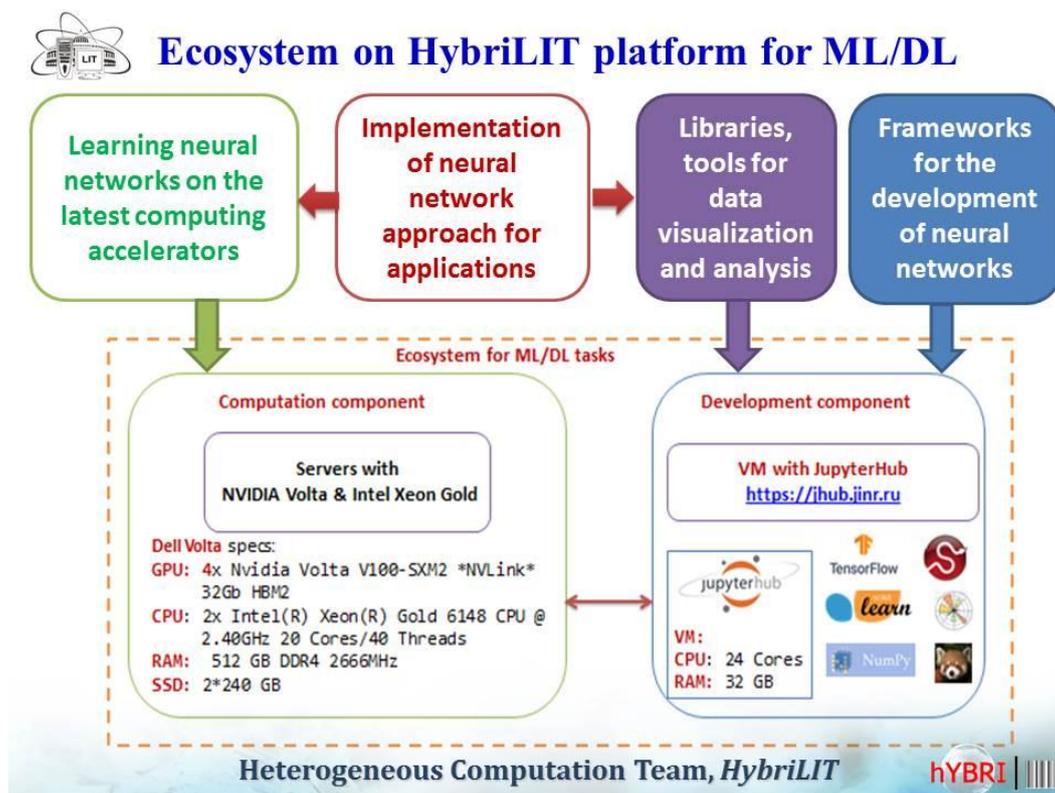


Рис. 16

- Масштабные численные эксперименты будут проведены для проекта ELI-NP в рамках недавно подписанного Меморандума о научном сотрудничестве (MoSC), в частности, путем внедрения и улучшения кода PIConGPU для лазерного ускорения элементарных частиц.

- Будет продолжена поддержка решения прикладных инженерно-физических задач на платформе HybriLIT с использованием пакетов программ адаптированных под параллельные вычисления, например, избранные пакеты COMSOL Multiphysics, LAMMPS, GAMESS и др.

- Будет продолжена разработка параллельных реализаций программных комплексов для решения ряда актуальных и новых конкретных задач, а именно:

- распараллеливание «долгих» функций при помощи инструментов OpenMP, MPI, CUDA/OpenCL при моделировании и реконструкций событий в экспериментах NICA.

- проведение расчетов на гетерогенных вычислительных платформах для исследования джозефсоновских структур;

- численное исследование многомерных моделей, базирующихся на эволюционных уравнениях;

- решение уравнений движения молекулярной динамики и уравнений сплошных сред;

- вычисления многократных интегралов, возникающих при проведении теоретических исследований, связанных с мегапроектом NICA и при исследовании различных физических процессов;

- решение мульти-физических задач в рамках проектирования ускорителей, дозиметрии и радиационной безопасности;

- исследование возможности увеличения производительности анализа данных в ROOT за счет использования графических процессоров, сравнение эффективности распараллеливания с помощью PROOF и OpenCL (для применения полученных результатов в работах по проекту NICA);

- диагонализация больших матриц в теории случайных матриц для описания свойств гигантских мультипольных резонансов тяжелых и средних ядер;

- проведение расчетов нестандартных задач магнитостатики;

- решение оптимизационных задач выбора наилучших параметров моделей сверхплотной ядерной материи при симуляциях соударений тяжелых ионов и в астрофизических применениях;
 - разработка эффективных методов декодирования на основе алгоритма LDPC с использованием генетического подхода;
 - разработка вычислительных схем метода конечных элементов для описания квадрупольных колебаний коллективной модели ядра;
 - разработка вычислительных схем для треугольной кулоновской задачи трех центров и применение к иону молекулы H_3^+ и молекуле H_2O ;
 - моделирование процессов однократной и многократной ионизации/фотоионизации биомолекул методом разделяемых потенциалов;
 - исследование однократной ионизации атомов и молекул быстрым протонным ударом в различных кинематических режимах.
- Наиболее важные разработанные пакеты параллельных программ будут внедрены в библиотеке JINRLIB.

Б. Аналитика Больших данных

- Разработка концепции и поэтапная реализация в рамках подхода Больших данных масштабируемой программно-аналитической платформы для сбора, хранения, обработки, анализа, поиска значимой информации и визуализации результатов для экспериментов MPD, SPD и BM@N на ускорительном комплексе NICA и группы экспериментов нейтринной программы ОИЯИ.
- Разработка методов и программного обеспечения для эффективного применения аналитики Больших данных для ресурсоёмких расчётов на сопроцессорах и графических процессорах для моделирования, реконструкции и обработки данных экспериментов (установки на ускорительном комплексе NICA, эксперименты нейтринной программы ОИЯИ, эксперименты на БАК).
- Разработка методик для реконструкции событий и интеллектуального мониторинга детекторов с использованием методов и технологий Больших данных и машинного обучения. Использование мощных высокоуровневых библиотек Больших данных, в том числе библиотеки для машинного обучения Spark MLlib, библиотеки для операций над графами и выполнения с ними параллельных операций GraphX, библиотеки для обработки потоковых данных в реальном времени Spark Streaming, библиотеки SparkSQL. Использование новых математических методов, таких как DQC (Dynamic Quantum Clustering), Complex Networks и др.
- Развитие методов анализа временных рядов с использованием технологий Больших данных для интеллектуального мониторинга распределенных вычислительных систем. Применение технологий машинного обучения и искусственного интеллекта для оптимизации функционирования распределенного компьютеринга физических экспериментов.

(4) Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений

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

- Развитие методов моделирования квантовых систем и квантовых информационных процессов:
 - Разработка методов квантовой обработки информации с помощью дипольных и спиновых атомных систем, анализ оптимальных методов спинтроники.

- Моделирование интеллектуальных сетей, выполняющих операции, основанные на квантовой теории принятия решений. Численный анализ моделей искусственного интеллекта.

- Исследование методов и алгоритмов квантового компьютеринга и квантовой информатики, ориентированных на машинное обучение (квантовое машинное обучение) с целью их адаптации к задаче реконструкции треков и обработки данных для коллайдера NICA.

- Сопоставление и анализ вычислительной эффективности адиабатического и «универсального» квантового компьютеринга на реальном оборудовании, доступным через облака.

- Разработка высокоэффективных алгоритмов, опирающихся на вычислительную теорию конечных групп, для исследования перепутанности многочастичных квантовых систем.

- Разработка квантовых алгоритмов для вычислений в рамках методов тензорных сетей с целью изучения фазовых переходов в решеточных моделях КХД при конечной плотности.

• Разработка методов компьютерной алгебры с применением к символьно-численному решению дифференциальных уравнений:

- Усовершенствование алгоритмов и программ исследования и решения систем нелинейных алгебраических и дифференциальных уравнений, возникающих в моделировании квантовых вычислений и других физических процессов и опирающихся на возможности гетерогенного кластера HybridIT и суперкомпьютера «ГОВОРУН».

• Разработка алгоритмов, запрашиваемых специальными темами

- Разработка новой вычислительной схемы построения квазивероятностного распределения Вигнера для составных систем.

- Разработка релятивистской версии уравнения Линдблада для открытых систем на основе уравнений Боголюбова для вектора состояния в релятивистской квантовой теории поля.

- Применение предложенных версий квазивероятностных распределений Вигнера и релятивистских уравнений Линдблада для исследования составных систем, взаимодействующих с интенсивным лазерным полем.

- Развитие алгебраических методов вычисления радиационных поправок, зависящих от многих кинематических переменных и масс, на основе функциональных уравнений и рекуррентных соотношений.

• Разработка и внедрение специальных компьютерных средств

- Встраивание в систему компьютерной алгебры Axiom модуля теоретико-полевых вычислений в физике высоких энергий, являющегося частью системы FORM – наиболее эффективной, по скорости вычислений указанного типа, среди систем компьютерной алгебры.

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

В настоящем предложении о продлении темы 1119 на 2020–2023 годы прямо указаны, имена сотрудников ЛИТ и основных сотрудников (руководителей групп) других лабораторий ОИЯИ, которые вносят важный вклад в формулирование конкретной проблемы, подлежащей решению, а также в интерпретацию полученных результатов. Сильное взаимодействие с командой МИВК подчеркнуто в этапе номер 3.

Основные этапы темы:

Этап темы

Лаборатория или другие подразделения ОИЯИ

Руководители

Основные исполнители

1. Математические и численные

Адам Г.

**методы для моделирования
сложных физических систем**

ЛИТ

ЛФВЭ

ЛТФ

ЛЯР

ЛНФ

ЛЯП

**2. Программные комплексы
и математические методы для
анализа экспериментальных
данных**

ЛИТ

ЛФВЭ

Буша Я.

Пузынин И.В.

Адам С., Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., Амирханов И.В., Барашенков И.В., Башашин М.В., Боголюбская А.А., Боголюбский И.Л., Войчеховски А.Э., Волохова А.В., Воскресенская О.О., Григорян О., Дикусар Н.Д., Жабицкая Е.И., Земляная Е.В., Калиновский Ю.Л., Карамышева Т.В., Кулябов Д.С., Лукьянов К.В., Махалдиани Н.В., Никонов Э.Г., Оганесян К., Пузынина Т.П., Рихвицкий В.С., Саркар Н.Р., Сархадов И., Саха Б., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Старченко Ю.Б., Сюракшина Л.А., Тухлиев З.К., Червяков А.М., Шарипов З.А., Широкова Н.Ю., Юкалова Е.П., Ямалеев Р.М.

Бойцов А.Ю., Геворгян С.Р., Донец Е.Е., Ходжибагиян Г.Г.

Альварес-Кастильо Д.Э., Блашке Д.Б., Брагута В.В., Воронов В.В., Воскресенский Д.Н., Гнатич М., Лукьянов В.К., Маслов К.А., Севастьянов Л.А., Тонеев В.Д., Фризен А.В., Хворостухин А.С., Юкалов В.И., Юшанхай В.Ю.

Олейничак А., Пенионжкевич Ю.Э., Рымжанов Р.А., Скуратов В.А.

Аскеров Э. Б., Белушкин А.В., Куклин А.И., Иванов А.И., Пепелышев Ю.Н.

Афанасьев Л.Г., Белолаптиков И.А., Карамышева Г.А., Карамышев О., Киян И.Н., Шайбонов Б.А., Ширков Г.Д.

Зрелов П.В.

Иванов В.В.

Акишина Е.П., Александров Е.И., Александров И.Н., Баранов Д.А., Башашин М.В., Белогуров С.Г., Войтишин Н.Н., Волохова А.В., Дереновская О.Ю., Жабицкая Е.И., Земляная Е.В., Злоказов В.Б., Казаков А.А., Казымов А.И., Козлов Г.Е., Костенко Б.Ф., Круглова Л.Ю., Лебедев С.А., Минеев М.А., Михайлова Т.И., Мусульманбеков Ж.Ж., Нечаевский А.В., Ососков Г.А., Пальчик В.В., Пряхина Д.И., Рихвицкий В.С., Сапожникова Т.Ф., Слепнёв С.К., Соснин А.Н., Ужинский В.А., Ужинский В.В., Филозова И.А., Шигаев В.Н., Яковлев А.В.

Батюня Б.В., Бычков А.В., Галоян А.С., Геворкян С.Р., Герценбергер К.В., Жежер В.Н., Капишин М.Н., Кечечян А.О., Ладыгин В.П., Ленивенко В.В., Малахов А.И., Мерц С.П., Разин

	С.В., Рогачевский О.В.
ЛТФ	Тонеев В.Д.
ЛЯР	Артюх А.Г., Пенионжкевич Ю.Э., Пятков Ю.В., Середа Ю.М., Соколов Ю.Г., Утенков В.К., Фомичев А.С., Цыганов Ю.С., Эрдэмчимэг Б.
ЛНФ	Балагуров А.М., Бобриков И.А., Киселев М.А., Козленко Д.П., Фронтасьева М.В.
ЛЯП	Бедняков В.А., Бедняков И.В., Жемчугов А.С., Ольшевский А.Г., Ткачѳв Л.Т.
3. Разработка численных методов, алгоритмов и программ для многоядерных и гибридных архитектур и аналитика Больших данных.	Адам Г. Чулуунбаатар О. Стрельцова О.И. Кореньков В.В. Зрелов П.В.
ЛИТ	Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., Александров Е.И., Башашин М.В., Белов С.Д., Беляков Д.В., Буша Я., мл., Войтишин Н.Н., Волохова А.В., Гусев А.А., Жабицкая Е.И., Земляная Е.В., Зуев М.И., Кадочников И.С., Матвеев М.А., Пелеванюк И.С., Подгайный Д.В., Полякова Р.В., Попкова Л.В., Пузынина Т.П., Сапожников А.А., Сапожникова Т.Ф., Саркар Н.Р., Сархадов И., Семенов Р.Н., Сердюкова С.И., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Тухлиев З.К., Филозова И.А., 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.
ЛФВЭ	Воронюк В.В., Герценбергер К.В., Коваленко А.Д., Мошкин А.А., Перепелкин Е.Е. Рогачевский О.В.
ЛЯП	Бедняков В.А., Наумов Д.В., Ольшевский А.Г., Самойлов О., Якушев Е.А.
ЛЯР	Апель П.Ю., Митрофанов С.В., Скуратов В.А.
ЛТФ	Виницкий С.И., Красовицкий П.М., Назмитдинов Р.Г., Попов Ю.В., Шукринов Ю.М.
ЛНФ	Кучерка Н., Новицкий В. В. + 3 чел.
4. Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений	Гердт В.П.
ЛИТ	Аббаслы Н., Абгарян В., Боголюбская А.А., Корняк В.В., Коткова Е.А., Рапортиренко А.М., Рогожин И.А., Тарасов О.В., Торосян А.Г., Хведелидзе А.М., Шарма К.К., Юкалова Е.П., Янович Д.А.
ЛТФ	Чижов А.В., Титов А.И., Физиев П., Юкалов В.И.
ЛФВЭ	Рогачевский О.В.
ЛЯР	Гикал Б.Н.

7. Бюджет темы (не более 1 стр.).

В тыс. долл.

	Наименование статей бюджета	сметная стоимость 2020-2023	В том числе по годам:			
			2020	2021	2022	2023
1	2	3	4	5		6
1	Заработная плата	8761.8	1887.9	2076.7	2284.4	2512.8
2	Единый социальный налог	2646.1	570.1	627.2	689.9	758.9
3	Соцбытфонд	569.5	122.7	135.0	148.5	163.3
4	Расходы по международному сотрудничеству	238.8	59.7	59.7	59.7	59.7
	а)командирование в страны-участницы	60.8	15.2	15.2	15.2	15.2
	б)командирование в страны-неучастницы	72.0	18.0	18.0	18.0	18.0
	в)командирование на территории России	28.0	7.0	7.0	7.0	7.0
	г)прием иноспециалистов	50.0	12.5	12.5	12.5	12.5
	д)проведение совещаний, представительские расходы	28.0	7.0	7.0	7.0	7.0
5	Материалы	104.0	20.0	24.0	28.0	32.0
6	Оборудование	365.0	80.0	90.0	95.0	100.0
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	12685.2	2740.4	3012.6	3305.5	3626.7

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**

- Исполнители темы 1119 представляют собой высококвалифицированный научный коллектив, среди исполнителей темы – 23 доктора и 47 кандидатов наук.

- Интерес к получению кандидатской или докторской степени по-прежнему высокий. Реализация права ОИЯИ на самостоятельное присуждение ученых степеней, закрепленного распоряжением Правительства Российской Федерации № 1792-р от 23-го августа 2017 г., к началу апреля 2019 находится в стадии уточнения технических деталей. Предусмотренный новый диссертационный совет (ДС) ЛИТ сохранит самый высокий целевой уровень качества, который характеризовал предыдущий ДС.

- Старший персонал обладает знаниями высочайшего научного класса, полученными благодаря многолетнему усердному труду.

- Честное высказывание мнений – это плюс.

- Научные работы выдающегося качества публикуются, как показано в начале раздела 5.

- Для повышения уровня образования всего персонала – в особенности молодых – поддерживаются разнообразные формы и средства (учебные курсы, учебные пособия, отраслевые конференции и семинары для молодых ученых и специалистов, групповые и индивидуальные консультации, научные семинары и т. д.).

Эти требования имеют решающее значение для эффективного использования новых средств ВПВ. Кластер HybriLIT и суперкомпьютер «ГОВОРУН» предъявляют высокие требования к своим пользователям. Они требуют, среди прочего, осознания новейших вычислительных парадигм для способности определить оптимальную вычислительную среду, которая может привести к максимальному увеличению производительности существующего оборудования. В связи с ВП вычислениями, мы должны отметить тяжелый труд, проделанный для создания адаптированной программной информационной среды новых онлайн-инструментов связи, обеспечивающих быстрый удаленный доступ и непосредственный обмен идеями среди пользователей.

- Особое значение для сообщества темы 1119 имеют периодические *конференции и семинары* ЛИТ.

В том числе – международные конференции ММСР (Математическое моделирование и вычислительная физика), имеющие давнюю историю в ЛИТ. Проводимые раз два года в сотрудничестве ЛИТ и исследовательских институтов из Словакии и Румынии, они получили солидную международную репутацию. Три издания трудов заслуживают особого упоминания:

- ММСР 2011 (72 участника, 41 принятая работа) – труды опубликованы издательством Шпрингер (том [LNCS 7125](#)) в 2012 г. (это стало настоящим бестселлером по данным маркетинговых отчетов Шпрингера);

- ММСР 2015 (90 участников, 58 принятых работ) – труды опубликованы в European Physical Journal Web of Conferences (EPJ-WoC) в 2016 г. (том [108](#));

- ММСР 2017 (257 участников, 100 принятых работ) – труды опубликованы в EPJ-WoC в 2018 г. (том [173](#)).

Следующая конференция ММСР 2019, будет проходить 1–5 июля 2019 г. в Старой Лесной в Словакии. В то время как темы, представляющие постоянный интерес, присутствовали во всех конференциях ММСР, каждая новая конференция ММСР приносила интересные инновации, отражающие актуальные общемировые тенденции в области вычислений. Это привлекало все большее количество участников, число которых достигло в 2017 году максимально возможного, которое организаторы способны были принять.

Особенность, которую следует отметить, – это увеличение доли молодых ученых, присутствующих на конференциях ММСР и на сопутствующих мероприятиях.

- Очень важное значение для подготовки специалистов для ОИЯИ, в том числе для компьютеринга мегапроектов (таких как эксперименты на коллайдере НИКА) будет иметь образовательная программа «Аналитика Больших данных» в рамках «Международной IT - школы по Большим данным», организуемой под патронажем ОИЯИ. Учебная программа «Аналитика Больших данных» включает лекции и практические занятия по методам и технологиям обработки и анализа Больших данных, распределенным вычислениям, машинному обучению. Цель программы – подготовка специалистов в области науки о данных (Data Science). Курс даёт понимание основополагающих принципов и технологий Больших данных, предоставляет знания о методах и средствах, необходимых для работы с ними, учит извлекать скрытые знания, выявлять закономерности, делать прогнозы. В рамках «Международной IT-школы по Большим данным» будет продолжена работа по организации национальных и международных школ для студентов, молодых ученых и специалистов.

• **Слабые стороны темы 1119**

Повседневная реальность указывает на возникновение трудностей в сборе идеальных команд:

- *Профессиональная гибкость* зрелых ученых, как правило, ниже желаемой.

Основным фактором, который может служить оправданием, является слишком быстрый темп развития программно-аппаратной среды. Произошедшие за последние три десятилетия серьезные изменения в вычислительных парадигмах трудно было освоить.

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

- С другой стороны, глубина *начальной математической подготовки* молодых ученых довольно низка. У нынешних выпускников ВУЗов часто отсутствуют прочные знания многих глав прикладной математики и численного анализа, а также базовые знания физических явлений и моделей. Этот первоначальный недостаток постепенно преодолевается путем кропотливой работы над конкретными задачами.

Однако есть эмпирический факт, который заслуживает рассмотрения:

- Высокий *показатель неудачных попыток* молодых людей стать успешными профессионалами в области компьютерной математики и вычислительной физики. Только сильные проходят испытание на выносливость, необходимое для владения мастерства в этой области. Ситуацию еще усугубляет *разрыв в уровне зарплат*: специалисты, работающие в ИТ-бизнесе, получают значительно более высокую зарплату по тем интеллектуальным усилиям, которые соответствуют их уровню образования. Тем не менее, оставшаяся часть этого процесса отбора – это сильные личности, которые любят свою работу и хотят стать все более и более искусными в ее выполнении.

Сотрудничество по теме:



Страна или международная организация	Город	Институт или лаборатория	Участники	Статус
Армения	Ереван	ННЛА	Ананикян Н.	Совместные работы
		ЕГУ	Чубарян Э.	Совместные работы
		РАУ	Саркисян А.А.	Совместные работы
Беларусь	Минск	ИПИИ НАН РА	Геворкян А.С.	Совместные работы
		ИМ НАНБ	Янович Л.Я.+3чел.	Совместные работы
			Егоров А.Д. Малютин В.Б.	
Болгария	Гомель	ГГТУ	Гончаров П.	Совместный проект
	София	IMI BAS	Колковска Н.	Совместные работы
		INRNE BAS	Богданова Н.+1чел	Совместные работы
			Антонов А.А.	Совместные работы
			Гайдаров М.К.	Совместные работы
		ДИМИТРОВА С.	Совместные работы	
		Кадрев Д.Н.	Совместные работы	
	КУПЕНОВА Т.Н.	Совместные работы		
Вьетнам	Ханой	SU	Димова С.Н.+2чел Порязов С.+1 чел.	Совместные работы
			Христов И.Г.	
			Христова Р.Д.	
		PU	Атанасова П.Х.	Совместные работы
Грузия	Тбилиси	GTU	Панайотова С.	
			Нгуен Ван Хъеу+2 чел. Во Чонг Тхак	Совместные работы
			Ломидзе И.	Совместные работы

		TSU	Георгадзе Г.	Совместные работы
		UG	Гогилидзе С.	Совместные работы
		RMI TSU	Лаврелашвили Г.	Совместные работы
Казахстан	Алматы	ИЯФ	Красовицкий П.М.	Совместные работы
Молдова	Кишинев	ИПФ АНМ	Базнат М.	Совместные работы
Монголия	Улан-Батор	NUM	Жанлав Т.	Совместные работы
		ИРТ MAS	Батгэрэл Б.	Совместные работы
Польша	Варшава	WUT	Словински Б.	Совместные работы
	Вроцлав	UW	Плута Я.	
			Блашке Д.+3 чел.	Совместные работы
			Фишер Т.	
	Краков	NINP PAS	Суликовский Я.М.	Протокол
	Люблин	UMCS	Гоздз А.	Совместные работы
	Отвоцк-Сверк	NCBJ	Полянски А.	Совместные работы
			Шута М.	
			Сандач А.	
			Словински Б.	
Россия	Москва	ИПМ РАН	Вабищевич П.Н.	Договор
			Калиткин Н.Н.	
			Поляков С.В.	
			Повещенко Ю.А.	
		ИОФ РАН	Егоров А.А. + 2 чел.	Протокол
		ИТЭФ	Титаренко Ю.Е.	Совместные работы
		МГОУ	Чаусов Д.Н.	Совместные работы
		МГУ	Кузаков К.А.	Совместные работы
			Перепелкин Е.Е.	
		НИВЦ МГУ	Воеводин В.В.	Совместные работы
		НИЯУ "МИФИ"	Воскресенский Д.Н.	Совместные работы
			Крянев А.В.	
			Климанов В.А.	
		РУДН	Севастьянов Л.А. + 2 чел.	Совместные работы
			Рыбаков Ю.П.	
			Бронников К.А.	
	Москва, Троицк	ИЯИ РАН	Ботвина А.	Совместные работы
	Гатчина	НИЦ КИ ПИЯФ	Кузнецова К.	Совместные работы
			Ханзадеев А.В.	
	Дубна	Ун-т "Дубна"	Аникина А. И.	Совместные работы
			Еремкина И.В.	
			Крюков Ю.А.	
	Пермь	ПГНИУ	Хеннер В.К.	Совместные работы
	Протвино	ИФВЭ	Борняков В.	Совместные работы
			Битюков С.И. + 2 чел.	
	Пушино	ИМПБ РАН	Лахно В.Д.	Совместные работы
		ИТЭБ РАН	Полозов Р.В. + 3	Совместные работы

		ИБ РАН	Чиргадзе Ю.Н.	Совместные работы
	С.-Петербург	НИИЭФА	Сычевский С.Е.	Совместные работы
		СПбГУ	Ламзин Е.А.	
			Кухтин В.П.	
	Саратов	СГУ	Богданов А.В.	Совместные работы
			Дегтярев А.Б.	
	Тверь	ТВГУ	Блинков Ю.А.+1 чел	Совместные работы
	Томск	ТГУ	Дербов В.Л.	
Румыния	Бухарест	IFIN-НН	Цветков В.	Совместные работы
			Скорик Н.А.	Совместные работы
			Замфир Н.В.	Гранты и проекты в рамках программы «Хулубей-Мещеряков»
			Берчеану А.	
			Тешилеану О.	
			Дулеа М. + 6 чел.	
			Исар А. + 2 чел.	
			Ангел Д.	
			Вишинеску М.	
		IFIN-НН – ELI-NP	Тешилеану О.	MoSC
			Берчеану А.	
		IFA	Бузату Ф.	Совместные работы
		ISS	Стан Й.	Совместные работы
			Севченко А.	
		UB	Штефанеску Д.	Протокол
	Клуж-Напока	INCDTIM	Бот А..	Проект в рамках программы «Хулубей-Мещеряков»
			Фаркас Ф.	
			Вароди К.	
			Флоаре К.	
			Белеан Б.	
			Труска Р.	
			Альберт С.	
			Бенде А.	
	Тимишоара	UVT	Визман Д. + 2 чел.	Проект в рамках программы «Хулубей-Мещеряков»
Словакия	Банска Бистрица	UMB	Коломейцев Е.	Совместные работы
	Кошице	IEP SAS	Валя М.	Совместные работы
		TUKE	Копчанскы П.	
			Бережны Ш.	Совместные работы
			Покорны И.	
		PJSU	Торок Ч.	Совместные работы
			Семанишин Г.	
Чехия	Прешов	PU	Поповичова М.	Протокол
	Прага	CTU	Броулим Я.	Совместные работы
Германия	Гессен	JLU	Хёне К.	Совместные работы
	Дармштадт	GSI	Зенгер П.	Совместные работы
			Зенгер А.	
			Зызак М.И.	

			Акишина В.П. Галатюк Т. Васильев Ю.О. Тупель С. Фишер Э. Фризе В.	
	Дрезден	HZDR	Бастраков С. Видера Р.	Совместные работы
		IFW	Хозои Л.	Совместные работы
	Кассель	Uni Kassel	Зайлер В.М.	Совместные работы
	Карлсруэ	KIT	Погосян Г.	Совместные работы
	Мюнхен	LMU	Вольтер Х.	Совместные работы
	Росток	Ун-т	Рёпке Г.	Совместные работы
	Фрайберг	TUBAF	Лейбинг С.	Совместные работы
	Франкфурт/М	Ун-т	Кисель И.В. Линденштрут В. Шёффлер М.С.	Совместные работы
Италия	Турин	INFN	Балестра Ф. Пираджино Г.	Совместные работы
	Бари	UniBa	Ла Скала Р.	Совместные работы
	Катания	LNS INFN	Ди Торо М.	Совместные работы
ЮАР	Кейптаун	UCT	Алексеева Н.	Соглашение
	Стелленбос	SU	Коули А.	Соглашение
Бельгия	Лувен-ля-Нев	UCL	Пиро Б.	Совместные работы
Бразилия	Сан-Карлос	IFSC USP	Багато В.С.	Совместные работы
Греция	Салоники	AUTH	Антониоу Я.	Совместные работы
Канада	Торонто	IBM Lab	Абрашкевич А.	Совместные работы
	Эдмонтон	U of A	Сафухи Х.	Совместные работы
Израиль	Тель-Авив	TAU	Юровский В.	Совместные работы
Китай	Хефей	IPPCAS	Сонг Ю.	Совместные работы
США	Дейвис	UCDavis	Кокс Т.	Совместные работы
	Кембридж	MIT	Пасюк М.	Совместные работы
	Лос-Анджелес	UCLA	Игнатенко М.	Совместные работы
	Мэдисон	UW-Madison	Ланаро А.	Совместные работы
	Сан-Диего	UCSD	Вебер Ф. Крутелев В.	Совместные работы
Таджикистан	Душанбе	TNU	Абдулоев Х.+ 3 чел.	Совместные работы
		ФТИ АН РТ	Муминов Х.Х.	Совместные работы
	Худжанд	ХГУ	Гафуров Х.+2 чел. Музафаров Д.З.+3 чел.	Совместные работы Протокол
Франция	Мец	UL	Джулакян Б.Б.	Совместные работы
ЦЕРН	Женева	ЦЕРН	Христов П. Аволио Дж. Астигаррага Е. Барберис Д. Рое Ш.	Совместные работы

			Формика А.	
			Галлас Е.	
			Озрук Н.	
			Рибон А. + 5 чел.	
			Рубиа К.	
Швейцария	Цюрих	ETH	Сорнетт Д.	Совместные работы
Япония	Сайтама	SU	Мисаки А.	Соглашение

Сан Диего /San Diego, CA/ UCSD (Калифорнийский университет в Сан Диего |University of California in San Diego | <https://ucsd.edu/>)

Москва/Moscow/ МГОУ /MSRU/ (Московский государственный областной университет | Moscow region state university | <https://mgou.ru/>)