

С 1 по 5 июля в Высоких Татрах (Словакия) проходила 10-я Международная конференция «*Математическое моделирование и вычислительная физика*» (ММСР'2019). Конференция была посвящена 50-летию факультета электротехники и информатики Технического университета Кошице. Организаторами этой конференции выступили Лаборатория информационных технологий ОИЯИ, Национальный научно-исследовательский институт физики и ядерной технологии им. Х. Хулубея (IFIN-HH) (Бухарест, Румыния), Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук (Кошице, Словакия), Технический университет (Кошице, Словакия), Университет им. П. Й. Шафарика (Кошице, Словакия).

Сопредседателями ММСР'2019 были В. В. Кореньков (ЛИТ ОИЯИ) и П. Совак (Университет им. П. Й. Шафарика), сопредседателями организационного комитета — Г. Адам (ЛИТ ОИЯИ, IFIN-HH) и М. Гнатич (Университет им. П. Й. Шафарика, ЛТФ ОИЯИ, Институт экспериментальной физики САН).

Научная тематика конференции охватывала широкий круг вопросов:

— математические методы и инструменты для моделирования сложных физико-технических систем, вычислительной биохимии и биоинформатики;

— методы, программное обеспечение и программные пакеты для обработки экспериментальных данных;

— методы компьютерной алгебры, квантовых вычислений и квантовой обработки информации;

— машинное обучение и аналитику больших данных;

— алгоритмы параллельных и гибридных вычислений.

В работе ММСР'2019 приняли участие более 100 ученых и специалистов из ОИЯИ и 15 стран: Армении, Белоруссии, Болгарии, Великобритании, Германии, Египта, Индии, Канады, Молдовы, России, Румынии, Словакии, США, Финляндии и Чехии. Надо особенно отметить большое количество российских научных центров и университетов, среди которых НИЦ «Курчатовский институт», ИМПБ РАН, ИПМ РАН, МГУ, МГИМО, РУДН, СПбГУ и др.

На открытии конференции с приветственными словами к участникам обратились директор ЛИТ ОИЯИ В. В. Кореньков и М. Гнатич. Пленарные и секционные доклады охватывали широкий круг вопросов применения методов математического моделирования в различных областях, связанных с теоретическими

The traditional international conference “*Mathematical Modeling and Computational Physics*” (ММСР'2019) was held in the High Tatra Mountains in Slovakia on 1–5 July. The conference was dedicated to the 50th anniversary of the Faculty of Electrical Engineering and Computer Science of the Technical University of Košice. Organizers of the conference were the Laboratory of Information Technologies of JINR, the Horia Hulubei National Institute for R&D in Physics and Nuclear Engineering (IFIN-HH) (Bucharest, Romania), the Institute of Experimental Physics of the Slovak Academy of Sciences (Košice, Slovakia), the Technical University of Košice (Slovakia) and the Pavol Jozef Šafárik University (Košice, Slovakia).

The co-chairmen of ММСР'2019 were V. Korenkov (LIT, JINR) and P. Sovák (Pavol Jozef Šafárik University); the co-chairmen of the Organizing Committee were G. Adam (LIT, JINR; IFIN-HH) and M. Hnatič (Pavol Jozef Šafárik University; BLTP, JINR; Institute of Experimental Physics, SAS).

The conference topics covered a wide range of issues including:

— mathematical methods and tools for modeling complex physical and technical systems, computational biochemistry and bioinformatics;

— methods, software and program packages for data processing and analysis;

— methods of computer algebra, quantum computing and quantum information processing;

— machine learning and big data analytics;

— algorithms for parallel and hybrid calculations.

More than 100 scientists and specialists from JINR and 15 countries (Armenia, Belarus, Bulgaria, Canada, the Czech Republic, Egypt, Finland, Germany, India, Moldova, Romania, Russia, Slovakia, the United Kingdom, and the USA) participated in the conference. Moreover, many Russian scientific centres and universities such as the Kurchatov Institute, IMPB RAS, ITAM RAS, MSU, Moscow State Institute of International Relations, the Peoples' Friendship University of Russia, SPSU, and others also took part in the conference.

At the conference opening, Director of JINR's LIT V. Korenkov and the co-chairman of the Organizing Committee M. Hnatič greeted the participants. Plenary and sectional reports covered a wide range of issues related



Стара-Лесна (Словакия), 1–5 июля. Участники международной конференции «Математическое моделирование и вычислительная физика» (ММСП'2019)

Stará Lesná (Slovakia), 1–5 July. Participants of the international conference “Mathematical Modelling and Computational Physics” (MMCP'2019)

to the application of mathematical modeling methods in various fields of theoretical research, experimental data analysis, and engineering applications.

Corresponding Member of RAS V.Voevodin (Moscow State University) opened the plenary session with a report on the implementation of a software and hardware environment monitoring system on the Lomonosov supercomputer. V.Braguta (BLTP, JINR) presented the simulation results of lattice QCD on the resources of the Govorun supercomputer (LIT, JINR). D.Podgainy (LIT, JINR) spoke about the HybriLIT heterogeneous platform, consisting of the education and testing polygon and the Govorun supercomputer, and about tasks calculated on its resources.

A number of plenary lectures were devoted to the problems of computational mathematics and modeling of complex systems. In his plenary report, V.Melezhik (BLTP, JINR) presented a quantum quasiclassical model for calculating heating and cooling processes in hybrid atom-ion traps. H.Safouhi (University of Alberta, Canada) made a presentation on the use of double exponential transformations to calculate molecular orbitals. Professor A.Bogdanov (St. Petersburg State University, Russia) in his report talked about analytical and numerical features of the solution of nonlinear problems using wave equations of the KdVB and Kadomtsev–Petviashvili-I type as examples. Gh.Adam (LIT, JINR; IFIN-HH, Romania) presented new results of constructing the Bayesian automatic adaptive quadrature. J.Honkonen (Finnish National Defense University, Finland) devoted his report to the

study of the renormalization of groups in the nonrelativistic quantum statistics.

One of the traditional areas of computational mathematics covered at all MMCP conferences is the area associated with the development of symbolic computation methods and computer algebra, as well as the development of quantum computation methods and their applications. In the framework of this direction, a number of interesting reports were made. A.Isar (National Institute of Physics and Nuclear Engineering, Romania) made a presentation on the dynamics of quantum correlations in Gaussian bosonic channels. V.GerdT (LIT, JINR) spoke about main stages in the development of quantum information from 1970 to 2019 and experimental manifestations of main theoretical developments. In his plenary report, D.Bondar (Tulane University, USA) gave an idea of a new systematic approach, Operational Dynamical Modeling (ODM), which can help in solving problems of quantum statistical dynamics.

A whole series of plenary lectures was devoted to various aspects of bioinformatics and the application of mathematical methods in biophysics. The conference participants were especially interested in the report of Corresponding Member of RAS V.Lakhno (IMPB, RAS, Russia) on theoretical foundations of nanobioelectronics and its potential application. Professor U.Hansmann (University of Oklahoma, USA) presented a report on the use of computer modeling in the study of protein folding. Professor S.Fritzsche (Helmholtz Institute Jena, Germany) presented the Jena Atomic Calculator toolkit for perform-

исследованиями, анализом экспериментальных данных и инженерными приложениями.

Открыл пленарную сессию член-корреспондент РАН В. В. Воеводин (МГУ, Москва) докладом о внедрении системы мониторинга программной и аппаратной среды на суперкомпьютере «Ломоносов». В. В. Брагута (ЛТФ ОИЯИ) представил результаты моделирования решеточной КХД на ресурсах суперкомпьютера «Говорун» (ЛИТ ОИЯИ). Д. В. Подгайный (ЛИТ ОИЯИ) рассказал о гетерогенной платформе HybriLIT, включающей в свою структуру учебно-тестовый полигон и суперкомпьютер «Говорун», и задачах, которые считаются на ее ресурсах.

Ряд пленарных докладов был посвящен вопросам вычислительной математики и моделированию сложных систем. В своем пленарном докладе В. С. Мележик (ЛТФ ОИЯИ) представил квантово-квазиклассическую модель для расчета процессов нагрева и охлаждения в гибридных атом-ионных ловушках. Х. Сафоху (Университет Альберты, Канада) выступил с докладом о применении двойных экспоненциальных преобразований для вычисления молекулярных орбиталей. Профессор А. В. Богданов (СПбГУ, Россия) представил аналитические и численные особенности решения нелинейных задач на примерах волновых уравне-

ний типа KdVB и Кадомцева–Петвиашвили. Г. Адам (ЛИТ ОИЯИ, IFIN-HH, Румыния) сообщил о новых результатах построения байесовской автоматической адаптивной квадратуры. Ю. Хонконен (Университет национальной обороны, Финляндия) посвятил свой доклад исследованию перенормировки групп в нерелятивистской квантовой статистике.

Одной из традиционных областей вычислительной математики, освещаемой на конференциях ММСР, является область, связанная с развитием методов символьных вычислений и компьютерной алгебры, а также с развитием методики квантовых вычислений и их приложений. В рамках этого направления был сделан ряд интересных докладов. А. Изар (Национальный институт физики и ядерной технологии им. Х. Хулубея, Румыния) выступил с докладом о динамике квантовых корреляций в гауссовских бозонных каналах. В. П. Гердт (ЛИТ ОИЯИ) рассказал об основных этапах развития квантовой информации с 1970 по 2019 г. и экспериментальных проявлениях основных теоретических разработок. В пленарном докладе Д. Бондаря (Тулейнский университет, США) было дано представление о новом систематическом подходе Operational Dynamical Modeling (ODM), который может помочь в решении задач квантовой статистической динамики.

ing (relativistic) calculations of atomic structures of various types and complexity.

The conference focused on the problem of experimental data processing and analysis, and Big Data technologies. A. Klimentov (Brookhaven National Laboratory, USA) spoke about the experience of integrating and using BigPanDA on high-performance computing systems in other scientific projects (SKA, DUNE, LSST, BELLE-II, JUNO), in addition to the ATLAS experiment at the Large Hadron Collider (CERN). Professor K. De (University of Texas at Arlington, USA) described future software and computing challenges for the ATLAS experiment after upgrading the Large Hadron Collider to higher luminosity (HL-LHC). In his plenary report, O. Rogachevsky (VBLHEP, JINR) presented a review of software for the MPD experiment at the NICA accelerator complex (Dubna). V. Friese (GSI, Darmstadt, Germany) devoted his report to the aspects of event reconstruction in the STS detector of the CBM experiment.

Nineteen plenary and more than 75 section talks were presented in the course of MMCP'2019.

In addition, the international IT school “Machine Learning, Parallel and Hybrid Computations & Big Data

Analytics” was held as part of the conference with the support of the JINR Directorate. The school programme included both lectures and practical classes with master classes.

Within the school, the participants listened to a lecture by D. Podgainy about the HybriLIT heterogeneous platform and the ecosystem provided on its basis for the software development using parallel programming technologies, and machine learning and deep learning tools. The lecture of G. Ososkov (LIT, JINR) devoted to the use of neural networks for solving problems in the field of high-energy physics and the subsequent practical lesson of P. Goncharov (Sukhoi State Technical University of Gomel, Belarus) on the use of ultra-precise neural networks were of great interest.

The school participants attended lectures and took part in workshops on parallel programming technologies conducted by the HybriLIT heterogeneous computing group (LIT, JINR). A. Ayriyan (LIT, JINR) and J. Buša, Jr. (LIT, JINR; Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Slovakia) talked about the OpenMP technology for programming multithreaded applications on multiprocessor systems with shared memory; E. Zemlyanaya

Целая серия пленарных докладов была посвящена различным аспектам биоинформатики и применению математических методов в биофизике. Особый интерес участников конференции вызвали доклады члена-корреспондента РАН В. Д. Лажно (ИМПБ РАН, Россия) о теоретических основах нанобиоэлектроники и ее потенциальном применении. Профессор У. Хансманн (Университет Оклахомы, США) представил доклад о применении компьютерного моделирования в процессах изучения фолдинга белков. Профессор С. Фрише (Йенский институт им. Г. Гельмгольца, Германия) рассказал о наборе инструментов Jena Atomic Calculator для выполнения (релятивистских) расчетов атомных структур различного типа и сложности.

Особое внимание в рамках конференции было уделено проблеме обработки и анализа экспериментальных данных и технологиям больших данных. А. А. Климентов (Брукхейвенская национальная лаборатория, США) рассказал об опыте интеграции и использовании BigPanDA на высокопроизводительных вычислительных системах в других научных проектах (SKA, DUNE, LSST, BELLE-II, JUNO), помимо эксперимента ATLAS на Большом адронном коллайдере (ЦЕРН). Профессор К. Де (Техасский университет в Арлингтоне, США) описал будущие задачи в обла-

сти программного обеспечения и вычислительной техники для эксперимента ATLAS после модернизации Большого адронного коллайдера для работы на более высокой светимости (HL-LHC). В пленарном докладе О. В. Рогачевского (ЛФВЭ ОИЯИ) был представлен обзор программного обеспечения для эксперимента MPD на ускорительном комплексе NICA (Дубна). В. Фризе (GSI, Дармштадт, Германия) посвятил свой доклад аспектам реконструкции событий в детекторе STS эксперимента CBM.

Всего на ММСР'2019 было представлено 94 доклада, из них 19 пленарных и 75 секционных.

В рамках конференции, при поддержке дирекции ОИЯИ, была организована международная компьютерная школа «Машинное обучение, параллельные и гибридные вычисления и аналитика больших данных». Программа школы включала в себя как лекционную часть, так и практические занятия с мастер-классами.

В рамках школы участники прослушали лекцию Д. В. Подгайного о гетерогенной платформе HybriLIT и предоставляемой на ее базе экосистеме для разработки программного обеспечения с применением технологий параллельного программирования и инструментов машинного и глубокого обучения. Большой

(LIT, JINR) and M. Bashashin (LIT, JINR) spoke about the use of the MPI technology for computations on computer systems with shared memory. O. Streltsova (LIT, JINR) and M. Zuev (LIT, JINR) reported on the CUDA technology, which allows increasing the computational performance through the use of Nvidia graphics accelerators. In addition, M. Bashashin held a master class on profiling and debugging tools for applications provided by Intel; M. Vala (P. J. Šafárik University, Slovakia) and Sh. Torosyan (LIT, JINR) talked about the basics of working with the GitLab joint code management system; D. Priakhina (LIT, JINR) held a master class on working with the machine learning library scikits.learn for the Python programming language.

Trainings were held on the HybriLIT heterogeneous platform with the support of the heterogeneous computing group of JINR's LIT.

The students also participated in the hackathon "Tatrathon 2019", in the course of which several teams developed their algorithms for solving mathematic tasks. The winners were awarded. The winners of the hackathon were A. Smetanin (Dubna University, Russia), M. Mogylnaya (P. J. Šafárik University, Slovakia), B. Beke (SPSE Košice, Slovakia), J. Čegiň (P. J. Šafárik Uni-

versity, Slovakia), L. Kopnický (Comenius University in Bratislava, Slovakia), D. Marov (Dubna University, Russia), E. Rezvaya (Dubna University, Russia), and M. Sefcik (P. J. Šafárik University, Slovakia).

интерес вызвала лекция Г. А. Ососкова (ЛИТ ОИЯИ), посвященная применению нейронных сетей для решения задач в области физики высоких энергий, и последовавшее за ней практическое занятие П. Гончарова (ГГТУ им. П. О. Сухого, Белоруссия) по использованию сверточных нейронных сетей.

Участники школы также прослушали лекции и приняли участие в практических занятиях по технологиям параллельного программирования, которые провели сотрудники группы по гетерогенным вычислениям HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ). А. С. Айриян (ЛИТ ОИЯИ) и Я. Буша-мл. (ЛИТ ОИЯИ, Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук, Словакия) рассказали о технологии OpenMP для программирования многопоточных приложений на многопроцессорных системах с общей памятью, Е. В. Земляная (ЛИТ ОИЯИ) и М. В. Башашин (ЛИТ ОИЯИ) — о применении технологии MPI для проведения расчетов на вычислительных системах с разделяемой памятью, О. И. Стрельцова (ЛИТ ОИЯИ) и М. И. Зуев (ЛИТ ОИЯИ) — о технологии CUDA, позволяющей увеличить вычислительную производительность за счет использования графических ускорителей компании Nvidia. Помимо этого, М. В. Башашин провел мастер-класс об инструментах профилирования и отладки приложений, предоставляемых компанией Intel, М. Валя (Университет им. П. Й. Шафарика, Словакия) и Ш. Г. Торосян (ЛИТ ОИЯИ) рассказали об основах работы с системой совместного управления кодом GitLab, Д. И. Пряхина (ЛИТ ОИЯИ) провела мастер-класс по работе с библиотекой машинного обучения scikits.learn для языка программирования Python.

Практические занятия проводились на гетерогенной платформе HybriLIT при поддержке группы по гетерогенным вычислениям ЛИТ ОИЯИ.

В рамках школы прошел хакатон «Tatrathon'2019», в ходе которого смешанные команды из студентов и аспирантов соревновались между собой в разработке и написании параллельных алгоритмов для решения математических задач. Победителями хакатона стали А. Сметанин (университет «Дубна», Россия), М. Могильная (Университет им. П. Й. Шафарика, Словакия), Б. Беке (Электротехническая средняя школа, Кошице, Словакия), Ю. Чегинь (Университет им. П. Й. Шафарика, Словакия), Л. Копницкий (Университет им. Я. Коменского, Словакия), Д. Маров (университет «Дубна», Россия), Е. Резвая (университет «Дубна», Россия), М. Шефчик (Университет им. П. Й. Шафарика, Словакия). Победители были награждены ценными призами.

Всего в работе конференции-школы приняли участие 26 студентов и аспирантов из Словакии, Румынии и России.

Материалы ММСР'2019 и школы доступны на информационном сайте конференции <http://mmsr.jinr.ru/2019>.