

Национальный центр физики и математики – от ПЕТА до ЗЕТТА вычислений

Р. М. ШАГАЛИЕВ, А. Н. ГРЕБЕННИКОВ, А. В. АЛЕКСЕЕВ

Предпосылки создания научного центра

В истории развития нашей страны имеется положительный опыт появления за пределами столицы и крупных городов научных центров и наукоградов, которые создавались с целью проведения в них как открытых, так и закрытых научных и научно-технических исследований и разработок, и, кроме того, являлись центрами развития территорий.

Подобные этапы развития проходили и зарубежные научные центры, прежде всего передовые национальные лаборатории США: Ливермор, Лос-Аламос, Сандия.

В Российской Федерации существует ряд центров, которые до сих пор остаются полностью закрытыми, как, например, Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»). И хотя в них сосредоточен огромный научный потенциал – кадры и инфраструктура – взаимодействие этих центров с открытой российской и мировой наукой и образованием носит естественные ограничения.

Для преодоления ограничений, обусловленных закрытым характером деятельности, при невозможности полного открытия проводимых

исследований целесообразно создание интерфейса – открытой части закрытых научных центров и наукоградов.

Как подтверждает мировой опыт и данные анализа достижений мировой науки, прямая институализация открытых частей в самостоятельные научные единицы способна дать огромный выигрыш в продвижении в мире российских научных приоритетов, способствовать притоку новых молодых высококвалифицированных кадров в российскую науку, послужить драйвером развития российских регионов. Данные центры способны стать местом научного прорыва в фундаментальных исследованиях за счет использования мощнейшей инфраструктуры закрытых центров и наукоградов.

Кроме этого, создание точки взаимодействия ученых и молодых специалистов из РФЯЦ-ВНИИЭФ, ведущих исследовательских организаций РАН, передовых вузов Российской Федерации, организаций ОПК для активного вовлечения молодежи в научные исследования способствует обеспечению адекватного ответа на технологические и геополитические вызовы.

В конце 2020 г. состоялся ряд поручений Президента и Правительства РФ, согласно которым в 2021 г. вблизи Федерального ядерного



центра ВНИИЭФ на открытой территории «Технопарк – Саров» (п. Сатис Нижегородской обл.) создан Национальный центр физики и математики (НЦФМ).

В течение 2021 г. были сформированы и утверждены Научная программа и Программа развития НЦФМ на период 2022–2030 гг.

Основные участники программы НЦФМ:

- Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»;
- федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская академия наук»;
- федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова»;
- федеральное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»;
- Министерство образования и науки Российской Федерации.

Участниками сформулированы 3 основных цели научной программы:

- комплексное решение наиболее актуальных задач современной физики и математики по направлениям исследований, необходимых для создания прорывных технологий и обеспечения лидерства Российской Федерации в мировом научном процессе;
- привлечение и подготовка кадров высшей квалификации в области физики и математики для научных организаций, предприятий оборонно-промышленного комплекса, ядерного оружейного комплекса Российской Федерации;
- обеспечение создания и развития исследовательской инфраструктуры, повышение роли и привлекательности российской науки.

Все научные исследования НЦФМ проводятся в соответствии с Научной программой, разработанной межведомственной рабочей группой. Заказчиком и координатором Научной программы является Министерство науки и высшего образования Российской Федерации. Ответственными исполнителями являются Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом», федеральное государственное бюджетное учреждение «Российская академия наук», федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова», федеральное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»».

Кроме ответственных исполнителей в Научной программе определены соисполнители и организации-партнеры:

- соисполнителями – органы исполнительной власти субъектов Российской Федерации, фонды поддержки научной, научно-технической, инновационной деятельности, а также институты развития и другие организации;
- организациями-партнерами – научные организации и образовательные организации высшего образования, организации, действующие в реальном секторе экономики, а также иные организации различных форм собственности или объединения таких организаций.

Всего по наиболее актуальным направлениям фундаментальных исследований в Научной программе было выделено 10 проектов:

- Проект 1. Национальный центр исследования архитектур суперкомпьютеров;
- Проект 2. Математическое моделирование на супер-ЭВМ экса- и зеттапроизводительности;
- Проект 3. Газодинамика и физика взрыва;
- Проект 4. Физика высоких плотностей энергии;
- Проект 5. Физика частиц, космология, астрофизика и геофизика;
- Проект 6. Ядерная и радиационная физика;
- Проект 7. Сильные и сверхсильные магнитные поля;
- Проект 8. Физика изотопов водорода;
- Проект 9. Искусственный интеллект и большие данные в технических и промышленных системах;
- Проект 10. Экспериментальная лабораторная астрофизика и геофизика.

Математическое отделение Института теоретической и математической физики РФЯЦ-ВНИИЭФ отвечает за формирование планов и реализацию исследований по Проектам 1 и 2.

Проект 1. «Национальный центр исследования архитектур суперкомпьютеров»

Для обеспечения экономической эффективности математического моделирования требуется постоянный рост производительности супер-ЭВМ, отвечающей требованиям суперкомпьютерного моделирования, со все более увеличивающейся степенью детализации и общим масштабом расчетов. Очевидно, бесконечное наращивание мощности полупроводниковых супер-ЭВМ все больше будет сопряжено с решением проблем их архитектуры и энергоэффективности. И все ближе то время, когда затраты на обеспечение проведения сверхвысокопроиз-

водительных вычислений в нынешних подходах превысят экономический эффект от внедрения суперкомпьютерного моделирования и научных исследований, основанных на его результатах, в технологические процессы отраслей промышленности, ОПК и в экономику страны в целом.

Основная цель научных работ в рамках Проекта 1 – проведение фундаментальных, прикладных и экспериментальных исследований в интересах выработки стратегии развития суперкомпьютеров в РФ и завоевания передовых позиций в областях высокопроизводительных вычислений и обработки больших данных.

Руководителями Проекта являются заместитель директора РФЯЦ-ВНИИЭФ по приоритетному технологическому направлению, заместитель научного руководителя РФЯЦ-ВНИИЭФ, первый заместитель директора ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ по вопросам математического моделирования и вычислительным системам, начальник научно-исследовательского отделения, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН Р. М. Шагалиев и доктор технических наук, академик РАН И. А. Каляев.

Научные исследования проводятся при непосредственном участии специалистов из ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и совместно с МГУ им. М. В. Ломоносова, НИВЦ МГУ, ННГУ, ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, ООО НИЦ «Супер-ЭВМ и нейро-компьютеров», АО «МЦСТ», АО НПЦ «Элвис», ЗАО НТЦ «Модуль», АО «Институт электронных управляющих машин им. И. С. Брука», ИПС РАН, Физтех им. А. Ф. Иоффе, ИНМЭ РАН, Самарский НИУ, АО «Концерн "Вега"», АО «Эврика» (г. Санкт-Петербург), ИФМ РАН (г. Нижний Новгород), ЮФУ (г. Ростов-на-Дону), НПК «ТЦ» (г. Зеленоград), ИФП.

Для достижения поставленной цели в Проекте 1 выбрано четыре основных научных направления исследований:

- 1) Центр исследования архитектур супер-ЭВМ;
- 2) фотонные вычислительные машины на цифровых принципах;
- 3) фотонные вычислительные машины на аналоговых принципах;
- 4) технологии квантовых вычислений.

По каждому направлению участниками определены цели и задачи научных исследований, которые были одобрены и утверждены Научно-техническим советом НЦФМ.

Задачами первой темы научных исследований (Центр исследования архитектур супер-ЭВМ) являются:

– анализ перспективных направлений развития супер-ЭВМ, выработка новых архитектурных решений, отвечающих требованиям численных методов и алгоритмов для полномасштабного реалистичного моделирования объектов;

– создание макетов подсистем супер-ЭВМ с использованием различных архитектурных подходов для высокопроизводительных расчетов;

– исследование и определение эффективности архитектурных решений супер-ЭВМ для различных классов задач, включая имитационное моделирование и искусственный интеллект.

Также в рамках этой научной темы проводятся исследования в интересах создания методов и средств, не зависящих от архитектурных и технологических особенностей вычислителей, создаются технологии управления потоками вычислительных задач в гетерогенной сети высокопроизводительных вычислителей и супер-ЭВМ с использованием искусственного интеллекта и мультиагентных методов оптимизации.

Особое внимание в сложившихся обстоятельствах уделяется исследованиям, направленным на выработку архитектуры компонентов на отечественной элементной базе, способов и топологий их объединения для обеспечения требуемых значений производительности и эффективности, разработке прототипов вычислительных и коммуникационных устройств, созданию макетов компонентов супер-ЭВМ на отечественной элементной базе.

Учитывая необходимость расчетного сопровождения экспериментальной базы НЦФМ ведутся исследования в интересах разработки технологии обработки, хранения сверхбольших данных с использованием супер-ЭВМ, технологии удаленного доступа для проведения вычислительных и экспериментальных исследований.

Два следующих научных направления Проекта 1 – «Фотонные вычислительные машины на цифровых принципах» и «Фотонные вычислительные машины на аналоговых принципах» – вобрали в себя исследовательские работы по созданию абсолютно нового класса средств вычислительной техники, способного преодолеть барьеры роста производительности и энергоэффективности современных полупроводниковых ЭВМ, и основанного на новых физических прин-

ципах организации вычислений. В рамках этих направлений проводятся анализ и исследования оптических компонентов фотонных вычислительных устройств, технологий и возможности их производства на предприятиях РФ; анализ и исследование вычислительных архитектур ФВМ, с последующей разработкой методики программирования ФВМ; создание компонентов и экспериментальных образцов функциональных блоков ФВМ; анализ и исследования блоков и систем ФВМ.

Исследования по четвертому научному направлению – «Технологии квантовых вычислений» – посвящены разработке технологии интеграции квантовых алгоритмов в существующее прикладное программное обеспечение. Для этого предварительно определяются классы задач для квантовых вычислительных систем для достижения «квантового превосходства», рассматриваются пути развития прикладного программного обеспечения для решения задач математического моделирования для квантовых вычислительных систем.

Проект 2. «Математическое моделирование на супер-ЭВМ экса- и зеттапроизводительности»

Научные исследования, сформулированные в рамках Проекта 2, в настоящее время составляют крайне актуальное направление. Основанное на применении суперкомпьютерных технологий, ввиду своей экономической эффективности по сравнению с натурными испытаниями, математическое моделирование является ключевым инструментом в реализации прорывных технических решений в интересах обеспечения конкурентоспособности современного общества и государства и одним из базовых средств, направленных на опережающее развитие его экономики и обороноспособности.

Активному развитию суперкомпьютерного моделирования также способствует и бурный рост производительности вычислительных машин. В течение 10–12 лет производительность супер-ЭВМ возрастает в среднем в 1000 раз. Уже сейчас очередным этапом явилось достижение производительности 1 Эксафлопс (10^{18} операций с плавающей точкой в секунду), следующим шагом в обозримом будущем станет достижение производительности в 1 Зеттафлопс (10^{21} операций в секунду). Сегодня можно выделить два основных барьера, которые нужно преодолеть в достижении зеттапроизводительности. Первый – это физические ограничения, обусловленные энерго-

потреблением, надежностью и конструктивными размерами аппаратной части супер-ЭВМ. Второй – необходимость кардинального пересмотра подходов к созданию программного обеспечения, эффективно работающего на супер-ЭВМ такой производительности как системного, обеспечивающего работу супер-ЭВМ, так и прикладного, реализующего решение сложнейших математических задач.

Достижение эксафлопсной и постэксафлопсной производительности потребует разработки и применения технологий, реализующих принципиально новые дисциплины вычислений и параллелизма, учитывающих сложности и неоднородности вычислительных систем. И согласно целям, обозначенным на самом высоком государственном уровне, созданные отечественные технологии суперкомпьютерного моделирования, ориентированные на супер-ЭВМ такой сверхвысокой производительности, должны быть задействованы при решении всего круга актуальных фундаментальных и прикладных задач, стоящих перед научными и промышленными организациями России.

Если говорить более конкретно, то для решения поставленной задачи необходимо в рамках Проекта:

- создать математические методы, высокопараллельные алгоритмы и расчетные технологии мирового класса для решения актуальных задач физики высоких плотностей энергии и механики сплошных сред;

- реализовать целый комплекс отечественных математических методик и алгоритмов для полномасштабного моделирования физических процессов в высокотехнологичных системах в таких отраслях, как авиастроение и ракетно-космическая отрасль, атомная энергетика, судостроение, автомобилестроение и др.;

- разработать технологии численного решения прикладных промышленных задач и моделирования естественных процессов с привлечением современных методов многокритериальной оптимизации и машинного обучения;

- разработать и создать математические методы для решения приоритетных задач в интересах ответов на новые вызовы, в частности, сквозные расчетные технологии моделирования различных высокотехнологических процессов.

Реализация проекта проходит в тесной кооперации специалистов из ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», ведущих исследовательских организаций РАН и передовых вузов Российской Федерации (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», МГУ

им. М. В. Ломоносова, ННГУ им. Н. И. Лобачевского, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, ИВМ им. Г. И. Марчука РАН, КФУ, НГУ, ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, ФГУП «Крыловский государственный научный центр», СПбПУ Петра Великого, БГТУ «Военмех», ИВМиМГ СО РАН, ИПНГ, Сколтех, МСЦ РАН – филиал НИИСИ РАН, ВШЭ ВНИИГАЗ).

Руководителями Проекта являются заместитель директора РФЯЦ-ВНИИЭФ по приоритетному технологическому направлению, заместитель научного руководителя РФЯЦ-ВНИИЭФ, первый заместитель директора ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ по вопросам математического моделирования и вычислительным системам, начальник научно-исследовательского отделения, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН Р. М. Шагалиев и директор НИВЦ МГУ, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН В. В. Воеводин.

Поставленные в рамках Проекта задачи сконцентрированы в три научные темы:

- 1) математические методы и алгоритмы эксафлопсного класса для моделирования физических процессов;
- 2) математические методы моделирования индустриальных систем;
- 3) разработка математических методов для решения приоритетных задач в интересах ответов на новые вызовы.

Первое направление – «Математические методы и алгоритмы эксафлопсного класса для моделирования физических процессов» – включает в себя разработку ориентированных на вычислительные системы рекордной производительности математических методик, численных методов, высокопараллельных алгоритмов моделирования процессов в области физики высоких плотностей энергии и механики сплошных сред:

- турбулентных течений жидкости и газа, в том числе с использованием прямого численного моделирования и бессеточных методов с применением PLES подходов;
- лазерного термоядерного синтеза;
- задач распространения и взаимодействия электромагнитного излучения;
- задач прочностного анализа и методов моделирования в интересах создания новых материалов и материалов с наперед заданными свойствами.

Второе направление – «Математические методы моделирования индустриальных систем» –

вобрало в себя работы по созданию комплекса отечественных математических методик и алгоритмов для полномасштабного моделирования физических процессов в высокотехнологичных индустриальных системах на основе эксафлопсных вычислительных технологий. Методики и алгоритмы ориентированы на создание и развитие технологии разработки конкурентоспособной наукоемкой продукции ведущих отраслей экономики РФ, таких как авиастроение и ракетно-космическая отрасль, атомная энергетика, судостроение, авиастроение и др.

Третье направление – «Разработка математических методов для решения приоритетных задач в интересах ответов на новые вызовы» – включает в себя разработку и реализацию концепции по созданию импортонезависимого специализированного программного обеспечения и сквозных расчетных технологий для математического моделирования существующих и перспективных технологических процессов. Также в рамках этого направления проводятся исследования в целях определения приоритетных направлений развития методов математического моделирования в ключевых отраслях экономики РФ.

Молодежная лаборатория НЦФМ

Одной из форм осуществления научных исследований в рамках деятельности Национального центра физики и математики, предложенной Министерством науки и образования, является создание молодежных лабораторий при ведущих вузах РФ для проведения под руководством молодых, но уже признанных ученых научных исследований по тематике НЦФМ с привлечением аспирантов и магистрантов вуза.

Одна из таких лабораторий – молодежная лаборатория («Математическое моделирование в индустриальных и фундаментальных исследованиях») создана в 2021 г. на базе НГТУ им. Р. Е. Алексеева в рамках деятельности научно-образовательного центра мирового уровня «Техноплатформа-2035», входящего в технологический проект «Передовые цифровые технологии». Руководитель лаборатории – сотрудник института теоретической и математической физики РФЯЦ-ВНИИЭФ, уже признанный ученый в области CFD-моделирования, доктор физико-математических наук Андрей Сергеевич Козелков.

Целью научного исследования лаборатории является разработка численных методов, моделей и алгоритмов для описания физических характеристик разреженных газов, крупно-

масштабных геофизических явлений (цунами) на основе полной гидродинамической системы уравнений Навье–Стокса для моделирования физических явлений в естественных природных условиях и условиях функционирования промышленных объектов в штатных и критических условиях.

В кооперацию лаборатории входят специалисты ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», НГТУ им. Р. Е. Алексеева, НИЯУ МИФИ и ПАО «Компания Сухой» филиал ОКБ «Сухого».

Доля исследователей в возрасте до 39 лет в численности основных сотрудников лаборатории составляет 95 % – 19 из 20 сотрудников лаборатории. В состав лаборатории входят 2 кандидата наук в возрасте до 35 лет (один из них докторант), 3 аспиранта в возрасте до 30 лет, 4 магистранта 1 курса, включая 2-х магистрантов НЦФМ, студент 4 курса НИЯУ МИФИ, а также молодые специалисты ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», являющиеся прямыми наставниками магистрантов и студентов.

Филиал МГУ им. М. В. Ломоносова в Сарове

Основополагающим фактором успешной реализации научных проектов Национального центра физики и математики является обеспечение центра высококвалифицированными кадрами, подготовленными в ведущих вузах России. Именно специалисты в фундаментальных областях науки быстрее осуществляют научные прорывы, совершают открытия, позволяющие принять правильное технологическое направление развития.

1 сентября 2021 г., после предшествовавшего в конце 2020 г. решения Президента Российской Федерации В. В. Путина, состоялось торжественное открытие филиала МГУ им. М. В. Ломоносова в г. Сарове. Новый филиал территориально расположен при НЦФМ в Технопарке-Саров и призван готовить магистров по фундаментальным направлениям физики и математики, в первую очередь для выполнения научной программы центра, используя для этого все преимущества классического университетского образования в условиях опережающего высокотехнологического развития экономики страны.

В результате профориентационных мероприятий в более чем 15 ведущих вузах России в первый год работы филиала был осуществлен набор 20 магистрантов на отделение математики и 30 магистрантов на отделение физики.

В отделении математики филиала МГУ им. М. В. Ломоносова в г. Сарове в рамках на-

правления подготовки «Прикладная математика и информатика» факультета вычислительной математики и кибернетики были реализованы 2 магистерские программы обучения:

1) вычислительные методы и методика моделирования (руководители – академики РАН Е. Е. Тыртышников и Б. Н. Четверушкин);

2) суперкомпьютерные технологии математического моделирования и обработки данных (руководитель – член-корреспондент РАН В. В. Воеводин).

Программы обучения включают в себя 34 дисциплины, в преподавании задействованы 32 преподавателя МГУ. Также разработаны 6 спецкурсов, которые студентам преподают высококвалифицированные специалисты РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Для студентов отделения математики были подготовлены и предложены на выбор более 40 индивидуальных тем научно-исследовательских работ по направлениям деятельности Института теоретической и математической физики (ИТМФ) РФЯЦ-ВНИИЭФ. К каждому из учащихся прикреплен индивидуальный научный руководитель из состава ведущих специалистов математического отделения института. Студентам организованы рабочие места в лабораториях ИТМФ и предоставлен доступ к вычислительным ресурсам математического отделения для практической реализации научной работы в рамках выбранных ими тем.

Такой индивидуальный подход к практической научной работе способствует более углубленному ознакомлению с перспективными направлениями научных исследований, проводимых в ИТМФ, и призван повысить интерес со стороны студентов отделения математики филиала МГУ им. М. В. Ломоносова в г. Сарове к участию в реализации широкого круга научных задач, стоящих перед институтом.

ШАГАЛИЕВ Рашит Мирзагалиевич –

член-корр. РАН, руководитель математического отделения ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ

ГРЕБЕННИКОВ Андрей Николаевич –

кандидат физ.-мат. наук, заместитель начальника математического отделения ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ

АЛЕКСЕЕВ Александр Витальевич –

кандидат физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник ИТМФ РФЯЦ-ВНИИЭФ