

Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных

Руководители темы: Адам Г.
Зрелов П.В.

Заместители: Буша Я.
Чулуунбаатар О.

Участвующие страны и международные организации:

Армения, Беларусь, Болгария, Великобритания, Вьетнам, Германия, Грузия, Египет, Израиль, Италия, Казахстан, Китай, Мексика, Молдова, Монголия, Польша, Россия, Румыния, Сербия, Словакия, США, Таджикистан, Франция, ЦЕРН, ЮАР.

Изучаемая проблема и основная цель исследований:

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, нейтронные исследования, физика сверхтяжелых и экзотических ядер. Численные или символично-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.

Ожидаемые результаты по завершении этапов темы:

1. Разработка 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. Разработка параллельных алгоритмов и их реализации в программных пакетах, настроенных на использование современных аппаратных архитектур, в первую очередь – гетерогенной вычислительной платформы HybriLIT, для уточнения моделей, исследования возможностей их совместного использования и сравнения с экспериментальными данными.
2. Программные комплексы и математические методы для анализа экспериментальных данных: разработка новых математических методов для извлечения значимой информации из данных, получаемых в экспериментах, проводимых в ОИЯИ 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.
3. Разработки для многоядерных и гибридных архитектур включают: развитие и поддержка информационно-вычислительной среды гетерогенной вычислительной платформы HybriLIT, представляющей учебно-тестовый полигон и суперкомпьютер "Говорун", 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 с учетом тенденций 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.

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 и BM@N на ускорительном комплексе NICA и группы экспериментов нейтринной программы ОИЯИ; разработка методов и программного обеспечения для эффективного применения аналитики Больших данных; создание системы для интеллектуального мониторинга распределенных вычислительных систем на основе платформы аналитики Больших данных с использованием потоковых данных и методов анализа временных рядов.

4. Развитие методов, алгоритмов и программного обеспечения 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 HybridIT.

Ожидаемые результаты по этапам темы в текущем году:

1. Детальный трехмерный численный анализ основных характеристик сверхпроводящих магнитов в рамках проектов NICA и NEW NUCLOTRON. Моделирование режимов работы будущего изохронного циклотрона MSC230.

Развитие методов и комплексов программ символьно-численного исследования: процессов (разлет вещества, формирование кратеров, абляция) в материалах под действием ультракороткого лазерного импульса; ядерных взаимодействий (расчет их характеристик, сопоставление с данными экспериментов и теоретическими оценками); стохастических кинетических моделей; моделей сложных систем в физике конденсированных состояний.

Разработка эффективных алгоритмов аппроксимации, сглаживания и численного интегрирования на основе метода базисных элементов (МБЭ).

Моделирование нематических жидких кристаллов 5CB и 8CB под действием ориентирующих сил.

Развитие методики моделирования облучения мишеней сложной структуры частицами высоких энергий на основе комплексной оптимизации параллельных алгоритмов и программ молекулярной динамики и непрерывно-атомистического метода.

Адаптация и применение метода разделенных формфакторов для исследования везикулярной структуры нанолечарств на основе фосфолипидов по данным малоуглового рассеяния.

Моделирование температурной эволюции нейтронных звезд с сильными магнитными полями с учетом дополнительных источников тепла. Применение метода байесовского вывода для построения спектра масс изолированных нейтронных звезд по данным многоканальной астрономии.

Изучение свойств дикварков и барионов в плотной и горячей ядерной материи, их влияние на рождение странности. Теоретическое описание и численное моделирование процессов рассеяния глюонов $gg \rightarrow \pi\pi$ при соударении тяжелых ионов.

2. Анализ рождения странных частиц в адрон-адронных и ядро-ядерных соударениях в рамках пакета Geant 4 для экспериментов BM@N и MPD. Моделирование pp взаимодействий в рамках адронных программ QGS и FTF пакета Geant4 для эксперимента SPD, в частности, рождения чармованных частиц.

Развитие и поддержка Монте-Карло генератора столкновений тяжелых ионов DCM-QGSM-SMM и его применение для анализа физических эффектов, измеренных на установках BM@N, SRC и MPD.

Алгоритмическая и программная поддержка эксперимента MPD: автоматизация индикации и удаления устаревших пакетов и их зависимостей при автоматизированной сборке nicadist для mpdroot.

Алгоритмическая и программная поддержка эксперимента $BM@N$: моделирование сигнальных откликов детекторов, восстановление пространственных координат, реконструкция данных в новой конфигурации трековых детекторов (сеанс 2022-2023 г.); геометрическая юстировка детекторов.

Тестирование, отладка в соответствии с требованиями пользователей и ввод в эксплуатацию конфигурационной, геометрической информационных систем и базы данных метаданных физических событий для экспериментов NICA.

Программная поддержка эксперимента ATLAS: доработка ATLAS Event Picking Service и ввод в эксплуатацию второй версии сервиса; адаптация информационной системы CREST для работы в программной среде ATHENA, развитие оперативного мониторинга TDAQ системы на базе GRAFANA9.

Развитие и улучшение алгоритмов и методов реконструкции траекторий заряженных частиц в катодно-стриповых камерах, оценка пространственного разрешения катодно-стриповых камер эксперимента CMS на данных Run3 (2022–2023 г.).

Разработка программного обеспечения системы обработки данных для проекта Baikal-GVD.

Монте-Карло моделирование фонового счёта сцинтилляционно-вольфрамовой компоненты детектора ОЛВЭ-HERO.

Развитие программного комплекса SAS для первичной обработки данных, полученных на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов с многодетекторной системой (модернизация перед стартом реактора).

Разработка веб-приложения, предназначенного для фитирования данных, полученных при исследовании кристаллографической текстуры различных объектов с помощью нейтронной дифракции и других современных методов нейтронографии.

Применение искусственных нейронных сетей и клеточных автоматов в задачах обработки экспериментальных данных.

3. Разработка нейросетевых алгоритмов распознавания, сегментации и классификации клеток головного мозга и поведенческих паттернов лабораторных животных.

Развитие методов машинного и глубокого обучения для: реконструкции событий в экспериментах MPD, $BM@N$ и SPD; анализа тонких структур в массовом распределении продуктов ядерных реакций в экспериментах с трансурановыми элементами; исследования тонких пленок нанокompозитов методами нейтронной и рентгеновской рефлектометрии; задач выявления заболеваний растений; мониторинга состояния окружающей среды.

Дальнейшее развитие hp-адаптивных высокоточных методов решения эллиптических задач на многоядерных компьютерах и разработка высоко масштабируемых параллельных алгоритмов для пространственных задач магнитостатики.

Развитие методов и программ интегрирования многомерных функций с использованием нейронных сетей на случай функциональных пределов.

Вычисление характеристик адсорбции сверхтяжелых атомов на поверхности золота методами теории функционала плотности с использованием вычислительного программного комплекса AMS на суперкомпьютере «Говорун».

Разработка алгоритмов расчета подбарьерных реакций слияния тяжёлых ядер в рамках метода связи каналов.

Разработка цифровых методов оценки скорости роста ошибок округления в равномерной метрике с использованием системы REDUCE на СК «Говорун».

Развитие методов и программных средств для решения сервисных и прикладных задач с использованием технологий обработки Больших данных и интеллектуального анализа.

Разработка и развитие методов хранения, обработки и физического анализа данных для экспериментов мегапроекта NICA в рамках подхода Больших данных.

4. Разработка квантовых алгоритмов и их реализация в среде симуляторов квантовых вычислений для исследования электронных оболочек атомов сверхтяжелых элементов, обработки и анализа данных эксперимента, интеллектуального управления различными системами.

Разработка встраиваемых интеллектуальных квантовых регуляторов для использования в качестве управляющих модулей различных робототехнических устройств. Разработка опытного образца квантового интеллектуального регулятора для согласованного управления давлением и расходом азота и гелия при охлаждении сверхпроводящего магнита в автоматизированном режиме (в том числе в условиях различных нештатных ситуаций).

Разработка и тестирование интеллектуальной системы управления режимами ВЧ-станций Нуклотрона ускорительного комплекса NICA, основанной на принципах квантовой программной инженерии.

Моделирование квантовых алгоритмов на симуляторах с использованием классических вычислительных архитектур (CPU, GPU) для решения задачи вычисления структуры электронного спектра простых молекул.

Численное исследование роли коллективной информации в сетях квантовых агентов.

Разработка алгоритмов конструктивной декомпозиции квантовых систем на подсистемы, основанных на методах компьютерной алгебры и вычислительной теории групп.

Исследование критериев редуцируемости к нулю полиномов на основе методов машинного обучения.

Создание пакета программ аналитических вычислений однопетлевых Фейнмановских интегралов для расчетов процессов рассеяния света на свете, $gg \rightarrow WW$, $hh \rightarrow ZZ$, $hh \rightarrow ZH$, $gg \rightarrow hh$.

Моделирование неравновесной эволюции в реальном времени и квантовых фазовых переходов в двумерной квантовой модели Изинга на квантовом компьютере.

Создание пакета программ быстрой генерации случайных матриц плотности кудитов произвольного ранга.

Моделирование квантовых регистров и квантовых логических вентилях, основанных на квантовых точках сложной геометрии.

Основные этапы темы:

Этап темы	Руководители
Лаборатория или другие подразделения ОИЯИ	Основные исполнители
1. Математические и численные методы для моделирования сложных физических систем	Адам Г. Буша Я. Пузынин И.В.
ЛИТ	Адам С., Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., Амирханов И.В., Бадреева Д.Р., Барашенков И.В., Башахин М.В., Боголюбская А.А., Воскресенская О.О., Волохова А.В., 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., Михайлова Т.И., Никонов Е.Г., Полякова Р.В., Пузынина Т.П., Рихвицкий В.С., Сархадов И., Саха Б., Тухлиев З.К., Червяков А.М., Шарипов З.А., Ширикова Н.Ю., Юкалова Е.П., Ямалеев Р.М.
ЛФВЭ	Агакишиев Г.Н., Ходжибагиан Г.Г.
ЛТФ	Воскресенский Д.Н., Гнатич М., Донков А.А., Коломейцев Е.Э., Лукьянов В.К., Пестов А.Б., Севастьянов Л.А., Фризен А.В., Хворостухин А.С., Юкалов В.И.
ЛЯР	Батчулуун Э., Мирзаев М.Н., Середа Ю.М., Скуратов В.А.,
ЛНФ	Дорошкевич А.С., Кучерка Н., Пепельшев Ю.Н., Перепелкин Е.Е., Попов Е.П., Шабалин Е.П.
ЛЯП	Карамышев О.В., Карамышева Г.А., Киян И.Н., Ляпин И.Д., Малинин В.А., Попов Д.В., Ширков Г.Д.

2. Программные комплексы и математические методы для анализа экспериментальных данных

ЛИТ

Зрелов П.В.
Иванов В.В.

Акишина Е.П., Александров Е.И., Александров И.Н., Баранов Д.А., Буша Я. мл., Войтишин Н.Н., Гнатич С., Дереновская О.Ю., Злоказов В.Б., Казымов А.И., Костенко Б.Ф., Минеев М.А., Мусульманбеков Ж.Ж., Пальчик В.В., Пряхина Д.И., Рихвицкий В.С., Сапожникова Т.Ф., Сатышев И., Слепнев С.К., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Соснин А.Н., Тухлиев З.К., Ужинский В.В., Филозова И.А., Шарипов З.А., Шестакова Г.В., Яковлев А.В.

ЛФВЭ

Беспалов Ю.В., Габдрахманов И.Р., Галоян А.С., Герценбергер К.В., Голутвин И.А., Горбунов Н.В., Гуськов А.В., Дряблов Д., Жежер В.Н., Зарубин А.В., Каменев А.Ю., Капишин М.Н., Каржавин В.Ю., Ленивенко В.В., Маканькин А.М., Мерц С.П., Морозов А.Н., Никифоров Д.Н., Пацюк М., Перельгин В.В., Петухов Ю.П., Рогачевский О.В., Румянцев М.М., Спасков В.Н., Шиманский С.С., Шматов С.В.

ЛТФ

Тонесев В.Д.

ЛЯР

Утенков В.К., Цыганов Ю.С.

ЛНФ

Балашою М., Иваньков А.И., Исламов А.Х., Ковалев Ю.С., Куклин А.И., Рижиков Ю.Л., Рогачев А.В., Ской В.В.

ЛЯП

Белолоптиков И.А., Пан А.Е., Ткачев Л.Г., Шайбонов Б.А.

УНЦ

Верхеев А.Ю.

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

ЛИТ

Адам Г.
Чулуунбаатар О.
Стрельцова О.И.
Зрелов П.В.

Айриян А.С., Аникина А.И., Баранов Д.А., Белов С.Д., Беляков Д.В., Бутенко Ю.А., Буша Я. мл., Гончаров П.В., Григорян О., Гусев А.А., Джавадзаде Дж.Н. оглы, Ильина А.В., Кадочников И.С., Калиновский Ю.Л., Матвеев М.А., Нечаевский А.В., Олейник Д.А., Ососков Г.А., Папоян В.В., Пелеванюк И.С., Петросян А.Ш., Семенов Р.Н., Сердюкова С.И., Стадник А.В., Ужинский А.В., Чулуунбаатар Г., Юлдашев О.И., Юлдашева М.Б.

ЛИТ-МИВК

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

ЛФВЭ

Герценбергер К.В.

ЛТФ

Виницкий С.И., Воскресенский Д.Н., Иванов Ю.Б., Либинг С., Попов Ю.В., Рахмонов И.Р., Шукринов Ю.М.

ЛЯР

Аксенов Н.В., Астахов А.А., Карпов А.В., Оганесян Ю.Ц., Пятков Ю.В., Самарин В.В.

ЛЯП

Жемчугов А.С.

ЛНФ

Авдеев М.В., Бадави В., Киселев М.А., Тропин Т.В., Фронтасьева М.В.

ЛРБ

Колесникова И.А., Ляхова К.Н., Северюхин Ю.С., Утина Д.М.

4. Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений

ЛИТ

ЛТФ

ЛЯП

ЛФВЭ

ЛРБ

Подгайный Д.В.

Хведелидзе А.М.

Зрелов П.В.

Абгарян В., Бондяков А.С., Буреш М., Гусев А.А., Зрелова Д.П., Зуев М.И., Иванцова О.В., Корняк В.В., Кузнецов Е.А., Палий Ю., Рапортиренко А.М., Решетников А.Г., Рогожин И.А., Рябов А.Р., Рябов Н.В., Сактаганов Н., Семашко С.В., Стадник А.В., Стрельцова О.И., Сюракшина Л.А., Тарасов О.В., Торосян А.Г., Ульянов С.В., Чулуунбаатар О., Юкалова Е.П., Янович Д.А.

Виницкий С.И., Тюрин Н.А., Юкалов В.И., Юшанхай В.Ю.

Катулин М.С.

Бровко О.И., Бутенко А.В., Решетников Г.П., Рогачевский О.В., Седых Е.В.

Чижов А.В.

Сотрудничество по теме:

Страна или международная организация	Город	Институт или лаборатория	Участники	Статус
Армения	Ереван	ЕГУ	Мардоян Л.Г. Погосян Г.С.	Совместные работы
		ННЛА	Ананикян Н. Пилоян А.	Совместные работы
		РАУ	Багдасарян Д.А. Казарян Э.М. Саркисян А.А.	Совместные работы
Беларусь	Минск	ИМ НАНБ	Егоров А.Д. Малютин В.Б.	Совместные работы
Болгария	София	IMI BAS	Георгиев И. Колковска Н.	Совместные работы
		INRNE BAS	Антонов А.А. Богданова Н.Б. Гайдаров М.К. Димитрова С. Кадрев Д. Купенова Т.Н.	Совместные работы
		SU	Димова С. Христов И.Г. Христова С.А.	Совместные работы
Великобритания	Плимут	Ун-т	МакМуллан Д.	Совместные работы
Вьетнам	Ханой	VNU	Во Чонг Тхак Льу Д.В.А. Нгуен Ван Хьеу	Совместные работы
Германия	Хошимин Гамбург Дармштадт	HCMUE	Льонг Ле Хай	Совместные работы
		Ун-т GSI	Книль Б.А. Акишина В.П. Васильев Ю.О. Галатюк Т. Зенгер П. Тупель С. Фризе В.	Совместные работы Совместные работы
	Кассель	Uni Kassel	Зайлер В.М.	Совместные работы

Грузия	Тбилиси	GTU TSU UG	Элашвили А. Георгадзе Г. Гогилидзе С.	Совместные работы Совместные работы Совместные работы
Египет	Гиза	CU	Абдулмагеад И.	Совместные работы
Израиль	Тель-Авив	TAU	Пясецки Е. Хен О.	Совместные работы
Италия	Генуя	INFN	Барберис Д.	Совместные работы
Казахстан	Алма-Ата	ИЯФ	Красовицкий П.М. Пеньков Ф.М. Мансурова М.	Совместные работы Совместные работы Совместные работы
Китай	Пекин	КазНУ CIAE	Пэйвэй Вэн	Совместные работы
Мексика	Мехико	UNAM	Хесс П.О.	Совместные работы
Молдова	Кишинев	МолдГУ	Базнат М.	Протокол
Монголия	Улан-Батор	IMDT MAS	Батгэрэл Б. Жанлав Т.	Совместные работы
Польша	Вроцлав Краков	UW INP PAS	Фишер Т. Альварес-Кастильо Д.Э. Суликовский Я.	Совместные работы Совместные работы
Россия	Владикавказ	JU UEK СОГУ	Брузда Д. Лула П. Гудиев Т.В. Котец А.Ф.	Совместные работы Совместные работы Соглашение
	Долгопрудный	МФТИ	Нартиков А.Г. Климай П.А. Митин А.В.	Совместные работы
	Дубна	Гос. ун-т "Дубна"	Жаткина К.Н. Руденко М.О.	Совместные работы
	Иркутск	ИГУ	Раджабов А.	Совместные работы
	Москва	ИТЭФ МГУ НИВЦ МГУ НИИЯФ МГУ НИЯУ "МИФИ"	Гаврилов В.Б. Никитенко А. Авдеев М.М. Кодолова О. Воеводин В.В. Померанцев В.Н. Артамонов А.А. Климанов С.Г. Крянев А.В. Приказчикова А.С.	Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы
		РНТОРЭС РУДН	Егоров А.А. Бронников К.А. Рыбаков Ю.П. Севастьянов Л.А.	Совместные работы Протокол
	Москва, Троицк Пушино С.-Петербург	РЭУ ИЯИ РАН ИМПБ РАН НИИЭФА	Валентей С.Д. Ботвина А. Лахно В.Д. Кухтин В.П. Ламзин Е.А. Сычевский С.Е.	Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы
		СПбГУ	Богданов А.В. Дегтярев А.Б. Тупицын И.И. Феофилов Г.А. Шабаев В.М.	Совместные работы
	Саратов Томск	СГУ ТГУ	Дербов В.Л. Скорик Н.А.	Совместные работы Совместные работы

Румыния	Бухарест	IFIN-НН	Исар А. Михаеску Т.	Соглашение
Сербия	Белград	Ун-т	Деспотович С. Хаджийойич М. Чосич М.	Совместные работы
Словакия	Кошице	UPJS	Эрич К. Вала М. Гнатич М.	Совместные работы
США	Кембридж, МА	MIT	Торок Ч. Калбов Дж. Сегара Е. Хен О.	Совместные работы
Таджикистан	Лос-Анджелес Душанбе Худжанд	UCLA ФТИ НАНТ ХГУ	Игнатенко М. Хохлов А.Х. Гафуров Х. Музафаров Д.З.	Совместные работы Совместные работы Совместные работы
Франция	Нанси	UL	Джулакян Б.Б.	Совместные работы
ЦЕРН	Сакле Женева	IRFU ЦЕРН	Формика А. Аволио Дж.	Совместные работы Совместные работы
ЮАР	Кейптаун	UCT	Рое Ш. Алексеева Н.	Совместные работы