

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

Руководители темы: Шматов С.В.
Чулуунбаатар О.

Заместители: Войтишин Н.Н.
Зрелов П.В.

Участвующие страны и международные организации:

Армения, Беларусь, Болгария, Великобритания, Грузия, Египет, Италия, Казахстан, Китай, Мексика, Монголия, Россия, Сербия, Словакия, США, Узбекистан, Франция, ЦЕРН, ЮАР.

Изучаемая проблема и основная цель исследований:

Тема направлена на организацию и обеспечение вычислительной, алгоритмической и программной поддержки подготовки и реализации экспериментальных и теоретических исследований, проводимых с участием ОИЯИ, разработку, развитие и использование вычислительных методов для моделирования сложных физических систем, изучаемых в рамках проектов ПТП ОИЯИ. В рамках темы будет осуществляться разработка математических методов и программного обеспечения, в том числе на основе алгоритмов машинного и глубокого обучения с использованием рекуррентных и сверточных нейронных сетей, для моделирования физических процессов и экспериментальных установок, обработки и анализа данных экспериментов в области физики элементарных частиц, ядерной физики, физики нейтрино, радиобиологии и др. Особое внимание будет уделено созданию систем распределенной обработки и анализа данных экспериментов и информационно-вычислительных платформ поддержки исследований, проводимых в ОИЯИ и других исследовательских центрах.

Основные направления работы – математическая и вычислительная физика для поддержки крупных инфраструктурных проектов ОИЯИ, в первую очередь, флагманский проект ОИЯИ NICA в режиме работы на фиксированной мишени (BM@N) и в режиме коллайдера для столкновений релятивистских тяжелых ионов (MPD) и на поляризованных пучках (SPD), нейтринный телескоп Baikal-GVD. Также будет продолжено сотрудничество с экспериментами в мировых ускорительных центрах (ЦЕРН, BNL и др.), экспериментами в области физики нейтрино и астрофизических экспериментах, программами радиобиологических исследований. Рассматривается возможность применения разрабатываемых методик и алгоритмов в рамках других проектов.

Главным направлением в моделировании сложных физических систем, включая состояния плотной ядерной материи и квантовые системы, будет разработка методов, комплексов программ и проведение численного исследования на основе решения соответствующих систем нелинейных, пространственно неоднородных интегральных, интегро-дифференциальных или дифференциальных уравнений в частных производных с большим количеством параметров, характеризующихся наличием критических режимов, бифуркаций и фазовых переходов с комплексным применением методов вычислительной физики, квантовой теории информации и гибридных квантово-классических методов программирования.

Также в рамках темы предполагается развитие работ по квантовому интеллектуальному управлению технологическими процессами и физическими установками в ОИЯИ и квантовым вычислениям в квантовой химии и физике.

Кроме того, будет продолжена подготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий в рамках IT-школы.

Проекты по теме:

Наименование проекта	Руководители проекта	Шифр проекта
1. Математические методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических процессов и экспериментальных установок, обработки и анализа экспериментальных данных	Шматов С.В. Заместители: Айриян А.С. Войтишин Н.Н.	06-6-1119-1-2024/2026

2. Методы вычислительной физики для исследования сложных систем

Земляная Е.В.
Чулуунбаатар О.
Заместители:
Калиновский Ю.Л.
Хведелидзе А.

06-6-1119-2-2024/2026

Проекты:

Наименование проекта	Руководители проекта	Статус
Лаборатория Ответственные от лаборатории		
1. Математические методы и программное обеспечение для моделирования, обработки и анализа экспериментальных данных	Шматов С.В. Заместители: Айриян А.С. Войтишин Н.Н.	Реализация
ЛИТ	Акишин П.Г., Акишина Е.П., Александров Е.И., Александров И.Н., Аникина А.И., Баранов Д.А., Бежанян Т.Ж., Буша Я., Гнатич С., Григорян О.А., Дереновская О.Ю., Дидоренко А.В., Дикусар Н.Д., Злоказов В.Б., Зуев М.И., Иванов В.В., Кадочников И.С., Казаков А.А., Кодолова О.Л., Корсаков Ю.В., Костенко Б.Ф., Минеев М.А., Мусульманбеков Ж.Ж., Нечаевский А.В., Никитенко А.Н., Никонов Э.Г., Олейник Д.А., Ососков Г.А., Пальчик В.В., Папоян В.В., Пелеванюк И.С., Петросян А.Ш., Подгайный Д.В., Пряхина Д.И., Сактаганов Н., Сатышев И., Слепнев С.К., Слижевский К.В., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Стрельцова О.И., Тухлиев З.К., Чижов К.А., Ужинский А.В., Ужинский В.В., Хабаев З.К., Шадмехри С.А., Шарипов З.А., Яковлев А.В.	
ЛФВЭ	Алексахин В.Ю., Апарин А.А., Беспалов Ю.В., Будковский Д.В., Бычков А.В., Габдрахманов И.Р., Галоян А.С., Герценбергер К.В., Головатюк В.М., Дряблов Д.К., Жижин И.А., Жежер В.Н., Зинченко А.И., Зинченко Д.А., Капишин М.Н., Каржавин В.Ю., Коробицин А.А., Крылов А.В., Ланёв А.В., Ленивенко В.В., Лобастов С.П., Мерц С.П., Мошкин А.А., Мурин Ю.А., Никифоров Д.Н., Пацюк М.А., Рогачевский О.В., Рябов В.Г., Тараненко А.В., Шалаев В.В., Шульга С.Г.	
ЛТФ	Зыкунов В.А., Казаков Д.И., Савина М.В., Теряев О.В., Тонеев В.Д.	
ЛНФ	Балашою М., Вергель К.Н., Иваньков А.И., Исламов А.Х., Ковалев Ю.С., Куклин А.И., Пепельшев Ю.Н., Рижиков Ю.Л., Рогачев А.В., Ской В.В., Фронтасьева М.В.	
ЛЯП	Бедняков В.А., Белолоптиков И.А., Борина И.В., Бородин А.Н., Денисенко И.И., Дик В., Елзов Т.В., Гринюк А.А., Гуськов А.В., Жемчугов А.С., Звездов Д.Ю., Крылов В.А., Курбатов В.С., Наумов Д.В., Пан А.Е., Сиренко А.Э., Сороковиков М.Н., Ткачев Л.Г., Храмов Е.В., Шайбонов Б.А., Шолтан Е.	
ЛРБ	Колесникова И.А., Северюхин Ю.С., Утина Д.М.	
УНЦ	Верхеев А. Ю., Каманин Д.В., Юлдашев Б.С.	

Краткая аннотация и научное обоснование:

Проект направлен на организацию и обеспечение вычислительной поддержки подготовки и реализации физической программы исследований, проводимых с участием ОИЯИ, разработку и развитие математических методов и программного обеспечения для моделирования физических процессов и экспериментальных установок, обработки и анализа данных экспериментов в области физики элементарных частиц, ядерной физики, физики нейтрино, радиобиологии и др. Особое внимание будет уделено созданию систем распределенной обработки и анализа данных экспериментов и информационно-вычислительных платформ поддержки исследований, проводимых в ОИЯИ и других исследовательских центрах.

Основные направления работы – математическая и вычислительная физика для поддержки крупных инфраструктурных проектов ОИЯИ, среди которых, в первую очередь, флагманский проект ОИЯИ NICA в режиме работы на фиксированной мишени (BM@N) и в режиме коллайдера для столкновений релятивистских тяжелых ионов (MPD) и на поляризованных пучках (SPD), нейтринный телескоп Baikal-GVD. Также будет продолжено сотрудничество с экспериментами в мировых ускорительных центрах (ЦЕРН, BNL и пр.), экспериментами в области физики нейтрино и астрофизических экспериментах, программами радиобиологических исследований. Рассматривается возможность применения разрабатываемых методик и алгоритмов в рамках других проектов мегасайенс (Супер чарм-тау фабрика, СКИФ и др.).

Ожидаемые результаты по завершении проекта:

Ревизия генераторов взаимодействий и их развитие для моделирования процессов взаимодействий легких и тяжелых ядер, в том числе при энергиях NICA (FTF, QGSM, DCM-QGSM-SMM и др.), и процессов за рамками Стандартной модели, таких как рождения частиц-кандидатов на роль темной материи, дополнительных хиггсовских бозонов и процессов, идущих с нарушением лептонного числа и пр. (QBN, Pythia, MadGraph и др.) для условий LHC при номинальной энергии и полной интегральной светимости до 450 фбн^{-1} .

Разработка алгоритмов реконструкции треков заряженных частиц для экспериментальных комплексов, в том числе на NICA и LHC, создание соответствующего программного обеспечения и его применение для обработки и анализа данных, изучения физико-технических характеристик детекторных систем.

Разработка масштабируемых алгоритмов и программного обеспечения для обработки многопараметрических, многомерных, иерархических наборов данных эксабайтного объема, в том числе на основе рекуррентных и сверточных нейронных сетей, для задач машинного и глубокого обучения, предназначенных в первую очередь для решения различных задач в экспериментах по физике частиц, в том числе для мегапроекта NICA и нейтринных экспериментов.

Создание и развитие систем обработки и анализа данных и современных инструментов исследований для международных коллабораций (NICA, нейтринная программа ОИЯИ, эксперименты на LHC).

Разработка алгоритмов и программного обеспечения для исследовательских проектов ОИЯИ в области нейтронной физики.

Разработка алгоритмов, программного обеспечения и информационно-вычислительных платформ для радиобиологических исследований, прикладных исследований в области протонной терапии и экологии.

Ожидаемые результаты по проекту в текущем году:

Завершение ревизии модели Geant4 FTF, более точное задание функций фрагментации кварков и дикварков в странные частицы в модели Geant4 QGS, проведение численных экспериментов по рождению гиперядер.

Физический анализ данных, полученных в экспериментах NICA MPD, NICA BM@N и NA61/SHINE, в рамках модели Geant4 FTF.

Учет различных эффектов в генераторе DCM-QGSM-SMM: зависимости времени жизни резонансов от плотности ядерной среды, подавление сечения рождения псевдоскалярных мезонов и усиление рождения гиперонов в плотной ядерной среде, деформации ядер. Разработка решеточной модели ядра и перколяционной модели мультифрагментации.

Математическое моделирование рождения и идентификации нерезонансных дибарионов на установке NICA SPD.

Математическое моделирование событий выбивания пар высокоимпульсных нуклонов из атомных ядер ускоренными частицами. Подготовка наброска экспериментального предложения для установки NICA.

Оценка сечений процессов рождения частиц темной материи и новых скаляров в рамках расширенной двухдублетной хиггсовской модели (2HDM+a/S, генератор MadGraph) в канале рождения пары мюонов/b-кварков и недостающей энергии, проведение соответствующего моделирования и анализа данных при условиях RUN2/3 LHC.

Оценка сечений процессов рождения частиц темной материи и новых скаляров в рамках Inert Doublet Model в конечном состоянии с двумя мюонами и недостающей энергией, проведение соответствующего моделирования и анализа данных при условиях RUN2/3 LHC.

Отладка процедуры тестирования чувствительных элементов калориметра высокой гранулярности эксперимента CMS, включая реконструкцию треков и оценку эффективности каждой ячейки детектора.

Разработка и отладка алгоритмов и методов реконструкции траекторий мюонов в катодно-стриповых камерах (КСК) мюонной системы эксперимента CMS для сравнения непрерывного и дискретного подходов вейвлет-анализа для разделения перекрывающихся сигналов, оценки пространственного разрешения камер КСК и эффекта их старения на данных, полученных в 2025 г. на установке GIF++ в ЦЕРН и в протон-протонных соударениях пучков LHC.

Разработка моделей машинного обучения и подходов их применения к идентификации частиц в BM@N на основе выборки, сбалансированной по типам классифицируемых частиц.

Нахождение поправочных параметров в координатном и угловом пространстве для геометрии детекторов STS и GEM эксперимента BM@N, разработка и программная реализация методов моделирования и обработки данных, а также их

развитие и адаптация для актуальных конфигураций ряда трекингвых детекторов GEM и Silicon Profilometer в 2024-2025 годах.

Внесение юстировочных поправок в геометрические модели микростриповых трековых детекторов FSD, GEM и CSC эксперимента VM@N, полученных в результате анализа восстановленных траекторий заряженных частиц на основе данных первого физического сеанса. Разработка и программная реализация методов моделирования и обработки данных для плоскости вершинного кремниевого детектора VSP для предстоящих сеансов эксперимента.

Переход от глобального классификатора, идентифицирующего частицы в MPD на полном диапазоне импульсов, к локальным классификаторам, основанным на градиентном бустинге и работающим в заданном диапазоне импульса с целью повышения эффективности распознавания частиц.

Модернизация программного комплекса эксперимента MPD для повышения точности и скорости реконструкции событий с помощью внедрения трекера ACTS в программную оболочку MPDroot. Интеграция последних версий внешних зависимостей в оболочку MPDRoot (ACTS, FairRoot, GEANT4, ROOT). Переход системы сборки на Alma Linux 9.5.

Оптимизация кодов программ реконструкции траекторий заряженных частиц в трековой системе эксперимента SPD для ускорения процедуры офлайн обработки события.

Применение графовых нейронных сетей для распознавания траекторий заряженных частиц в эксперименте MPD.

Исследование свойств алгоритмов реконструкции струй/кластеров адронов в условиях SPD. Оценка сечений процесса прямого рождения фотона в кварк-глюонном рассеянии.

Реализация модели обработки и хранения моделированных данных эксперимента SPD, актуальной на 2025-2026 год, на основе ранее созданного прототипа распределенной системы массовой обработки данных и нового прикладного ПО, созданного на программной платформе Gaudi.

Функциональное тестирование и отладка компонентов и интерфейсов между компонентами системы, обеспечивающей многоступенчатую обработку данных на кластере фильтрации событий в режиме реального времени SPD OnLine Filter.

Обеспечение необходимого уровня функционирования, отвечающего потребностям в массовом моделировании физических процессов эксперимента SPD в распределенной вычислительной среде на основе системы управления нагрузкой PanDA и системы управления данными на основе пакета RUCIO DDM. Развитие систем управления процессами обработки.

Адаптация программного кода реконструкции каскадов высоких энергий к быстрой системе обработки данных Baikal-GVD.

Разработка программ обработки данных для комплекса детекторов рассеяния, включая позиционно-чувствительный детектор прямого пучка.

Модернизация системы ATLAS CREST под новую архитектуру с классами Dto, развитие сервиса EventIndexPicking для выполнения тестов R2R4 Milestone, модификация TDAQ Resource manager для использования в Run4. Развитие и поддержка эксплуатации информационных систем экспериментов VM@N, MPD для описания геометрии установок, конфигурации детекторов, процесса менеджмента. Участие в разработке онлайн системы DAQ MDT.

Построение модели машинного обучения для задачи классификации адронов и гамма-квантов в эксперименте TAIGA.

Моделирование разрешения детектора ОЛВЭ-HERO для упрощенной модели различных размеров.

Разработка математических методов и алгоритмов для реконструкции траекторий в задаче моделирования протонного цифрового томографа.

Использование МБЭ-многочленов высоких порядков для совершенствования методики обработки реакторных данных и нейтронных шумов реактора ИБР-2М.

Разработка веб-сервиса для автоматизации анализа данных, получаемых с использованием тест-системы «Водный лабиринт Морриса» в экспериментах, направленных на изучение поведенческих реакций лабораторных животных, подверженных воздействию различных факторов.

Исследования в области повышения точности моделей классификации болезней растений по фотографиям. Оценка влияния различных политик аугментации данных и механизмов внимания (attention mechanism) на показатели моделей.

Исследования в области прогнозирования загрязнения почв с использованием данных дистанционного зондирования земли и различных методов машинного обучения. Улучшение существующего функционала и предоставление новых возможностей для контроля и прогнозирования состояния окружающей среды.

Разработка алгоритма восстановления энергетического спектра нейтронов по результатам измерений спектрометром Боннера.

2. Методы вычислительной физики для исследования сложных систем

Земляная Е.В.
Чулуунбаатар О.
Заместители:
Калиновский Ю.Л.
Хведелидзе А.

Реализация

- ЛИТ Абгарян В., Адам Г., Адам С., Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., И.В., Бадреева Д.Р., Барашенков И.В., Башашин М.Б., Боголюбовская А.А., Бордаг Л., Буракова А.Д., Буреш М., Буша Я. (мл.), Буша Я. (ст.), Верховцева К.Д., Волохова А.В., Воскресенская О.О., Годеридзе Д., Григорян О., Гусев А.А., Зуев М.И., Карамышева Т.В., Ковалев О.О., Корняк В.В., Кулябов Д.С., Лукьянов К.В., Мавлонбердиева С.Д. Махалдиани Н.В., Михайлова Т.И., Нечаевский А.В., Никонов Э.Г., Палий Ю., Папоян В.В., Подгайный Д.В., Полякова Р.В., Рахмонов А.Р., Рихвицкий В.С., Рогожин И.А., Сархадов И., Саха Б., Сердюкова С.И., Стрельцова О.И., Сюракшина Л.А., Тарасов О.В., Торосян А.Г., Тухлиев З.К., Хмелев А.В., Червяков А.М., Чулуунбаатар Г., Чулуунбаатар Х., Шарипов З.А., Юкалова Е.П., Юлдашев О.И., Юлдашева М.Б., Ямалеев Р.М.
- ЛТФ Абдельгани М.А., Виницкий С.И., Воскресенский Д.Н., Гнатич М., Донков А.А., Куликов К.В., Лукьянов В.К., Назмитдинов Р.Г, Рахмонов И.Р., Фризен А.В., Шукринов Ю.М., Юкалов В.И., Юшанхай В.Ю.
- ЛЯР Батчулуун Э., Карпов А.В., Мирзаев М.Н., Самарин В.В., Середа Ю.М.
- ЛНФ Киселев М.А., Кучерка Н., Перепелкин Е.Е.
- ЛЯП Карамышев О.В., Карамышева Г.А., Киян И.Н., Попов Е.П.
- ЛФВЭ Бычков А.В., Ходжибагиян Г.Г.
- ЛРБ Бугай А.Н., Чижов А.В.

Краткая аннотация и научное обоснование:

Проект направлен на разработку и применение математических и вычислительных методов для моделирования сложных физических систем, изучаемых в рамках ПТП ОИЯИ и описываемых системами динамических нелинейных, пространственно неоднородных интегральных, интегро-дифференциальных или дифференциальных уравнений, зависящих от параметров моделей. Эволюция решений таких систем может характеризоваться наличием критических режимов, бифуркаций и фазовых переходов. Математическое моделирование является неотъемлемой частью современных научных исследований и требует адекватной математической постановки задач в рамках изучаемых моделей, адаптации известных и развития новых численных подходов для эффективного учета особенностей исследуемых физических процессов, разработки алгоритмов и комплексов программ для высокопроизводительного моделирования на современных вычислительных системах, включая ресурсы Многофункционального информационно-вычислительного комплекса ОИЯИ.

Ожидаемые результаты по завершении проекта:

Разработка методов, алгоритмов и комплексов программ для проведения численных исследований взаимодействий различных типов в сложных системах ядерной физики и квантовой механики.

Методы моделирования многофакторных процессов в материалах и конденсированных средах под внешними воздействиями.

Методы решения задач моделирования при проектировании экспериментальных установок и оптимизации режимов их работы.

Методы моделирования сложных процессов в плотной ядерной материи на основе уравнения состояния.

Методы моделирования квантовых систем с применением методов квантовой теории информации и гибридных квантово-классических методов программирования.

Ожидаемые результаты по проекту в текущем году:

Численное исследование реакций глубокого подбарьерного синтеза и квазиупругого рассеяния тяжелых ядер в рамках метода связанных каналов с оптическими потенциалами. Разработка алгоритмов и программ для вычисления в рамках геометрических коллективных моделей характеристик тяжелых ядер, включая ядро урана-238 с двухъямным потенциалом.

Разработка методов моделирования химических связей и реакций с участием тяжелых и сверхтяжелых элементов с целью интерпретации результатов термохроматографических экспериментов, проводимых в ЛЯР.

Исследование равновесных свойств и неравновесной динамики сложных статистических систем, включая атомные ловушки и гетерогенные нейронные сети, на основе оптимизированной теории возмущений.

Модификация метода и комплекса программ моделирования ядерных реакций в транспортно-статистическом подходе. Расчет физических характеристик процессов передачи и фрагментации в реакциях тяжелых ионов.

Исследование влияния ядерной среды на процессы упругого и неупругого взаимодействия протонов с ядрами в широком диапазоне энергий. Анализ наблюдаемых характеристик в реакциях различного типа с участием легких экзотических ядер.

Моделирование сложных процессов в материалах, облучаемых пучками тяжелых ионов, на основе комбинированного применения методов молекулярной динамики и механики сплошных сред. Развитие методов оценки распределения энергетических потерь облучающими частицами в таких процессах.

Моделирование сложных процессов в сверхпроводящих структурах различного типа. Разработка методов высокопроизводительных вычислений физических наблюдаемых в широком диапазоне параметров моделей джозефсоновских переходов. Разработка и программная реализация вычислительной схемы для моделирования динамики кольцевой системы параллельных j_0 -переходов. Исследование межвихревого взаимодействия в интертипных сверхпроводниках с примесями.

Разработка программного модуля аналитических вычислений с использованием Python-библиотек, позволяющего автоматизировать представление уравнений для численного моделирования цепочки наномангнитов, связанных с джозефсоновским переходом, с учетом различных типов взаимодействия между элементами.

Моделирование сложных процессов в физико-химических системах различного типа. Развитие методов высокопроизводительного численного исследования структуры и свойств везикулярных систем различного типа. Исследование методами молекулярной динамики взаимодействия бета-амилоидных пептидов с фосфолипидными мембранами в везикулярных, бицеллоподобных и бислойных структурах с целью изучения влияния заряда пептида и липида, а также состава липидов на это взаимодействие в различных термодинамических фазах липида. Получение на этой основе новой информации о структурных и динамических свойствах фосфолипидных мембран.

Численное исследование локализованных структур в системах, описываемых нелинейными динамическими уравнениями, включая периодические решения (осциллоны) в одно- и трехмерных моделях теории поля.

Разработка методов и программ для моделирования формирования магнитных полей изохронных циклотронов при различных режимах работы. Развитие методов конечных и граничных элементов в среде COMSOL для оптимизации расчетов электромагнитных и тепловых процессов сложных физических систем.

Разработка методов моделирования матричных элементов объемных интегральных уравнений магнитостатики. Проведение расчетов по оптимизации характеристик сверхпроводящих магнитов на основе трехмерного компьютерного моделирования.

Развитие эффективных методов решения уравнений, описывающих модели физических полей и режимы работы экспериментальных установок. Разработка высокопроизводительных методов численного решения эллиптических задач. Развитие и исследование свойств вычислительной схемы на основе квадратизации по Апфельроту и разностной схемы Кагана для численного интегрирования динамических систем с полиномиальной правой частью.

Исследование системы Эйнштейна-Максвелла-Дирака в рамках астрофизического и космологического гравитационного поля. Исследование свойств сверхпроводимости сильновзаимодействующей ядерной материи в недрах нейтронных звезд на основе автоматизированного отбора моделей охлаждения этих звезд. Введение критерия оценки адекватности моделей по соответствию наблюдаемым данным поверхностной температуры и возраста звезд.

Развитие моделей с нелокальным взаимодействием для описания спектра псевдоскалярных и векторных мезонов; вычисление на этой основе спектра масс, констант взаимодействия и других характеристик. Описание процессов рождения и диссоциации тяжелых кваркониев.

Разработка и усовершенствование алгоритма для моделирования трекинга частиц в рамках процессов, исследование которых планируется на установке NICA (SPD). Исследование применимости Бьёркеновской модели к выживаемости J/ψ частиц в среде, образованной соударением тяжелых ионов при условиях NICA.

Разработка конструктивных методов описания составных конечномерных квантовых систем в рамках формализма Вейля – Швингера с использованием компьютерной алгебры и вычислительной теории групп.

Получение и применение функциональных соотношений для редукции многопетлевых Фейнмановских интегралов.

Разработка и реализация на квантовом полигоне МИВК квантовой схемы алгоритма QAOA для нахождения основного состояния модели Швингера с топологическим слагаемым.

Решение задачи оптимизации работы однокубитных вентилях под воздействием управляющего радиочастотного поля.

Сравнительный анализ квазивероятностных распределений в элементарных и составных конечномерных квантовых системах.

Вычисление корреляции запутанность – положительность функции Вигнера для кудитов.

Активности:

Наименование активности	Руководители	Сроки реализации Статус
Лаборатория Ответственные от лаборатории		
1. Квантовое интеллектуальное управление технологическими процессами и физическими установками в ОИЯИ и квантовые вычисления в квантовой химии и физике	Зрелов П.В. Ульянов С.В.	2024-2026 <div style="border: 1px solid black; padding: 2px; display: inline-block;">Реализация</div>
ЛИТ	Баранов Д.А., Зрелова Д.П., Иванцова О.В., Катулин М.С., Кузнецов Е.А., Решетников А.Г., Рябов А.Р., Рябов Н.В., Сюракшина Л.А.	
ЛФВЭ	Беспалов Ю.Г., Бровко О.И., Никифоров Д.Н., Решетников Г.П.	
ЛТФ	Юшанхай В.Ю.	

Краткая аннотация и научное обоснование:

Основной изучаемой проблемой данной активности является разработка и эффективное использование технологий интеллектуальных вычислений и квантовой самоорганизации неточных знаний в задачах робастного управления с целью повышения надежности функционирования физических установок. Решение задач основано на возможности повышения робастности существующих систем управления за счёт встраиваемых баз знаний. Самоорганизующиеся системы управления проектируются и поддерживаются разрабатываемым в проекте программным инструментарием на основе платформы, объединяющей мягкие вычисления и квантовые оптимизаторы баз знаний. Будет проведена разработка встраиваемых самоорганизующихся регуляторов для систем интеллектуального управления технологическими процессами, устройствами и установками ОИЯИ (в том числе для случаев непредвиденных и непредсказуемых ситуаций) и задач интеллектуальной когнитивной робототехники.

Исследование эффективности квантовых алгоритмов направлено на решение задач квантовой химии и физики новых функциональных материалов. Применение известных квантовых алгоритмов и их развитие будет осуществляться на симуляторах с классической вычислительной архитектурой. Предусматривается создание программного продукта для вычисления электронной и магнитной структур молекулярных комплексов и кристаллических фрагментов новых функциональных материалов с использованием квантовых симуляторов на классических вычислительных архитектурах.

Ожидаемые результаты по завершении активности:

Создание прототипа квантового нечеткого ПИД – регулятора и демонстрационного образца робота с встроенным прототипом регулятора.

Создание прототипа интеллектуальной системы управления криогенными системами для сверхпроводящих магнитов ускорительного комплекса НИКА на основе квантового нечеткого ПИД – регулятора. Подготовка патента.

Методология построения и структура интеллектуальной системы управления ВЧ -станцией.

Проверка эффективности квантовых алгоритмов вариационного типа, реализованных на квантовых симуляторах классической архитектуры посредством их применения к количественному описанию диссоциации простых молекул, а также электронной и спиновой структуры основного состояния типичных решеточных моделей квантовой теории.

Ожидаемые результаты по активности в текущем году:

Разработка платформонезависимой программной библиотеки квантового симулятора для выполнения алгоритма квантового нечеткого вывода в режиме реального времени на компьютере с классической архитектурой применительно к задаче построения системы управления охлаждения азотом плеча бустера ускорительного комплекса NICA.

Разработка алгоритма обучения с подкреплением квантовой нечеткой нейронной сети с демонстрацией на автономном роботе на робототехническом полигоне.

Разработка алгоритмов формирования маршрута и обхода препятствий на основе квантового машинного обучения для мобильной роботизированной платформы.

В рамках задачи управления многоконтурными системами будет разработан метод квантового интеллектуального координационного управления на основе квантового нечеткого вывода в системе управления охлаждением сверхпроводящих магнитов.

В рамках исследования многокубитных скрытых корреляций в самоорганизующихся системах управления будет разработана структура симулятора баз знаний квантового координационного регулятора в системе управления охлаждения азотом СП-магнита на классическом компьютере для 30 входных кубитов.

В рамках построения методологии дистанционной настройки и обмена знаниями для интеллектуальной системы управления будут разработаны протоколы обмена базами знаний и дистанционной настройки регуляторов в среде TANGO Control системы управления охлаждения азотом бустера ускорительного комплекса NICA.

Автоматизация подготовки универсального вычислительного окружения для выполнения квантовых вычислений на различных архитектурах.

Исследование потенциала квантовых генеративно-сопоставительных сетей (QGAN) на примере задачи генерации синтезированных RGB-изображений.

В контексте материаловедения планируется вычислительное описание химических реакций на кристаллических поверхностях. С этой целью процесс моделирования адсорбции и реакции молекул на поверхностях будет реализован с использованием алгоритмов квантовых вычислений.

2. Подготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий

**Кореньков В.В.
Нечаевский А.В.
Пряхина Д.И.
Стрельцова О.И.**

2024-2026

Реализация

ЛИТ Бежания Т.Ж., Войтишина Е.Н., Воронцов А.С., Дереновская О.Ю., Зуев М.И., Мажитова Е., Пелеванюк И.С.

УНЦ Верхеев А.Ю., Каманин Д.В.

Краткая аннотация и научное обоснование:

Подготовка и переподготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий на базе МИВК ОИЯИ и его учебно-образовательных компонент в целях:

– повышения квалификации сотрудников ОИЯИ для развития научных проектов, в том числе класса мегасайенс, реализуемых в ОИЯИ или с его участием, а также для создания и поддержки цифровой экосистемы (ЦЭС) ОИЯИ;

– распространение компетенций в области вычислительной физики и информационных технологий в регионы России и страны-участницы ОИЯИ для увеличения кадрового потенциала ОИЯИ и сотрудничающих с Институтом организаций.

Основной предпосылкой к созданию активности является необходимость формирования научно-исследовательской среды для обеспечения профессионального роста ИТ-специалистов, создание и развитие научных групп, привлечение новых сотрудников в проекты ОИЯИ. Дополнительная подготовка кадров преимущественно по заказу лабораторий ОИЯИ должна быть направлена на развитие специальных компетенций, углубленных знаний и навыков практического характера в области вычислительной физики и информационных технологий.

Ожидаемые результаты по завершении активности:

Проведение мероприятий для сотрудников ОИЯИ по изучению современных ИТ-технологий и возможностей работы на компонентах МИВК и в ЦЭС.

Формирование набора проектов ОИЯИ, в которых могут принять участие студенты.

Формирование списка компетенций и необходимых курсов для реализации проектов.

Разработка учебных курсов и образовательных программ, которые обеспечат подготовку кадров для решения различных задач в проектах.

Создание экосистемы для реализации образовательных программ на базе МИВК ОИЯИ, включающего облачную инфраструктуру и гетерогенную вычислительную платформу HybridIT.

Создание программно-информационной среды и платформы для организации и проведения мероприятий, лекций, практических занятий, хакатонов и т.д.

Привлечение сотрудников ОИЯИ и Информационных центров ОИЯИ, научных работников организаций из стран-участниц ОИЯИ, преподавателей ведущих образовательных организаций, сотрудничающих с ОИЯИ для проведения учебных и научных мероприятий.

Формирование программ мероприятий и организация взаимодействия с университетами и Информационными центрами ОИЯИ.

Ожидаемые результаты по активности в текущем году:

Проведение научно-исследовательских семинаров по информационным технологиям, в том числе для пользователей МИВК ОИЯИ и ЦЭС.

Подготовка и реализация образовательных программ, учебных курсов по информационным технологиям.

Информационная поддержка активности: создание и развитие сайта с размещением учебных материалов, результатов работы над проектами участников Школы по информационным технологиям.

Развитие компонент экосистемы для реализации образовательных программ.

Проведение Школ по информационным технологиям, учебных практик для студентов вузов РФ и стран-участниц ОИЯИ.

Сотрудничество по теме:

Страна или международная организация	Город	Институт	Статус	Участники
Армения	Ереван	ЕГУ	Соглашение	Тумасян А. Айрапетян А. Геворкян А. Тумасян А.
		ННЛА	Соглашение	
Беларусь	Гомель	ГГУ	Совместные работы	Андреев В.В. Максименко Н.В.
	Минск	ИМ НАНБ ИФ НАНБ	Соглашение Обмен визитами	Малютин В.Б. + 2 чел. Килин С.Я. Михалычев А.Б.

			Совместные работы	Прокопеня Н.О. Килин С.Я. Михалычев А.Б. Прокопеня Н.О.
		НИИ ЯП БГУ	Обмен визитами	Ермак Д.В. Макаренко В.В. Мосолов В.А.
			Совместные работы	Ермак Д.В. Макаренко В.В. Мосолов В.А.
Болгария	София	SU	Совместные работы	Димитров В. Христов И.Г. Христова Р.Д. Младенов Д.
Великобритания	Оксфорд	Ун-т	Соглашение	Галлас Э.
Грузия	Тбилиси	GTU	Совместные работы	Гиоргадзе Г.
		TSU	Совместные работы	Элашвили А.
		UG	Совместные работы	Гогилдидзе С.
Египет	Гиза	CU	Совместные работы	Абдулмагеад И.
	Каир	ASRT	Соглашение	Эш М.
Италия	Генуя	INFN	Совместные работы	Барберис Д.
Казахстан	Алма-Ата	ИЯФ	Совместные работы	Буртебаев Н.Т. Сахиев С.К.
		НИИ ЭТФ КазНУ	Совместные работы	Еркинбаева Л.К.
	Астана	ЕНУ	Совместные работы	Курмангалиева Ж.Д.
Китай	Пекин	CIAE	Совместные работы	Пэйвэй Вэн Чэнцзянь Линь
Мексика	Мехико	UNAM	Совместные работы	Хесс П.О.
Монголия	Улан-Батор	IMDT MAS	Соглашение	Батгэрэл Б.
		MUST	Совместные работы	Улзийбаяр В.
Россия	Архангельск	САФУ	Соглашение	Гошев А.А.
	Владивосток	ДВФУ	Соглашение	Регузова А.В.
	Владикавказ	СОГУ	Соглашение	Гутнова А.К. Нартиков А.Г. Огоев А.У.
	Воронеж	ВГУ	Совместные работы	Кургалин С.Д.
	Гатчина	НИЦ КИ ПИЯФ	Совместные работы	Ким В. Кириянов А.К.
	Дубна	Гос. ун-т "Дубна"	Совместные работы	Деникин А.С. Кирпичева Е.Ю. Черемисина Е.Н.
		Филиал МГУ	Совместные работы	Боос Э.Э. Ольшевский А.Г.
	Иркутск	ИГУ	Соглашение	Танаев А.Б.
	Москва	ИТЭФ	Совместные работы	Гаврилов В.Б.
		МГУ	Совместные работы	Смелянский Р.Л. Соколов И.А. Сухомлин В.А. Фомичев В.В.
		НИВЦ МГУ	Совместные работы	Воеводин В.В.
		НИИЯФ МГУ	Совместные работы	Боос Э. Дудко Л.В. Лохтин И.П. Петрушанко С.В.

		НИУ ВШЭ НИЯУ "МИФИ"	Соглашение Совместные работы	Ратников Ф.Д. Артамонов А.А. Данилов М.В. Коротков М.Г. Тараненко А. Черкасский А.И.
		РНТОРЭС РУДН	Совместные работы Соглашение	Егоров А.А. Бронников К.А. Малых М.Д. Рыбаков Ю.П. Севастьянов Л.А.
	Москва, Троицк Петропавловск- Камчатский Протвино Пушино Самара	ФИАН ИЯИ РАН КамГУ ИФВЭ ИМПБ РАН СамГУ	Совместные работы Совместные работы Соглашение Совместные работы Совместные работы Совместные работы	Дремин И.М. Гниненко С.Н. Исрапилов Д.И. Петров В.А. Лахно В.Д. Баскаков А.В. Салеев В.А.
	Санкт-Петербург	СПбГУ	Совместные работы	Богданов А.В. Дегтярев А.Б. Зароченцев А.К. Щеголева Н.Л.
	Саратов Саров Тверь	СГУ Филиал МГУ ТвГУ	Совместные работы Совместные работы Совместные работы	Дербов В.Л. Воеводин В.В. Цветков В.П. Цветков И.В. Чемарина Ю.В.
	Томск	ТГУ ТПУ	Совместные работы Соглашение	Скорик Н.А. Лидер А.
	Тула	ТулГУ	Совместные работы	Сычугов А.А. Французова Ю.В.
Сербия	Челябинск Белград	ЮУрГУ Ун-т	Совместные работы Совместные работы	Соколинский Л.Б. Деспотович С. Хаджийойич М. Чосич М. Эрич К.
Словакия	Кошице	UPJS	Совместные работы	Вала М. Гнатич М.
США Узбекистан Франция ЦЕРН	Арлингтон Ташкент Сакле Женева	UTA АН РУз IRFU ЦЕРН	Совместные работы Совместные работы Совместные работы Совместные работы	Озтурк Н. Мирзаев С.З. Формика А. Аволио Дж. Ван Левен М. Де Моншено Г. Мак-Брайд П. Рибон А. Рое Ш. Хеккер А.
ЮАР	Кейптаун	УСТ	Совместные работы	Алексеева Н. Дика А.