

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

**Руководители темы:** Шматов С.В.  
Чулунбаатар О.

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

## **Участвующие страны и международные организации:**

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

## **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 неодномерных 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, квантовых вычислений в квантовой химии и физике.

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

## **Проекты по теме:**

<b>Наименование проекта</b>	<b>Руководители проекта</b>	<b>Шифр проекта</b>
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. Чулунбаатар О. Заместители: Калиновский Ю.Л. Хведелидзе А.	06-6-1119-2-2024/2026

## Проекты:

Наименование проекта	Руководители проекта	Статус
Лаборатория Ответственные от лаборатории	Шматов С.В. Заместители: Айриян А.С. Войтишин Н.Н.	Реализация
<b>1. Математические методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических процессов и экспериментальных установок, обработки и анализа экспериментальных данных</b>		
ЛИТ	Акишин П.Г., Акишина Е.П., Александров Е.И., Александров И.Н., Аникина А.И., Аушев Т.А., Баранов Д.А., Бежанян Т.Ж., Буша Я., Гнатич С., Грень Н.В., Григорян О.А., Дереновская О.Ю., Дидоренко А.В., Дикусар Н.Д., Злоказов В.Б., Зуев М.И., Иванов В.В., Казаков А.А., Кирьянов А.К., Кодолова О.Л., Конак А.С., Корсаков Ю.В., Коршунова П.А., Костенко Б.Ф., Минеев М.А., Монаков Н.Г., Мусульманбеков Ж.Ж., Нечаевский А.В., Никитенко А.Н., Никонов Э.Г., Олейник Д.А., Омелянчук С.С., Осетров Е.С., Осоксов Г.А., Пальчик В.В., Папоян В.В., Пелеванюк И.С., Петров Н.К., Петросян А.Ш., Подгайный Д.В., Поликарпов С.М., Пряхина Д.И., Решетников А.Г., Романычев Л.Р., Рябов А.Р., Сатышев И., Седельников А.С., Слепнев С.К., Слижевский К.В., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Стрельцова О.И., Толочко Е.Н., Тухлиев З.К., Ульянов С.В., Ужинский А.В., Ужинский В.В., Хабаев З.К., Чадеева М.В., Чижов К.А., Чистов Р.Н., Шадмехри С.А., Шарипов З.А., Яковлев А.В.	
ЛФВЭ	Алексахин В.Ю., Апарин А.А., Беспалов Ю.В., Бровко О.И., Будковский Д.В., Бычков А.В., Габдрахманов И.Р., Галоян А.С., Герценбергер К.В., Головатюк В.М., Дряблов Д.К., Жижин И.А., Земляничкина Е.В., Зинченко А.И., Зинченко Д.А., Капишин М.Н., Каржавин В.Ю., Коробицын 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., Пепельышев Ю.Н., Рижиков Ю.Л., Рогачев А.В., Ской В.В., Фронтасьева М.В.	
ЛЯП	Бедняков В.А., Белолаптиков И.А., Борина И.В., Бородин А.Н., Гринюк А.А., Гуськов А.В., Датта А., Денисенко И.И., Дик В., Елжов Т.В., Жемчугов А.С., Звездов Д.Ю., Крылов В.А., Курбатов В.С., Наумов Д.В., Пан А.Е., Прокошин Ф.В., Симбирятин Л.Л., Сиренко А.Э., Сороковиков М.Н., Шайбонов Б.А.	
ЛРБ	Колесникова И.А., Северюхин Ю.С., Утина Д.М.	
Ассоциированный персонал	Анисёнков А.В., Амирханов А.Н., Алпатов Е.В., Баскаков А.В., Бузыкаев А.Р., Буланова С.А., Булеков О.В., Бурмасов Н.А., Быковский М.А., Доронин С.А., Дубинин Ф.А., Дуров А.И., Ермак Д.В., Жалов М.Б., Завидов Е.Н., Захаров А.М., Зеленов А.В., Иваницев Д.А., Карпова Ю.Д., Ким В.Т., Коваленко В., Кондратьев М.А., Кузнецова Е.В., Курова А.С., Лазарева А.В., Левков А.А., Макаренко В.В., Малаев М.В., Малеев В.П., Мокоена Т.Э., Мосолов В.А., Морозихин А.Н., Некрасов П.В., Нигматкулов Г.А., Петров Г.Е., Поваров А.С., Рябов Ю.Г., Смирнов С.Ю., Солдатов Е.Ю., Соснов Д.Е., Тертышная К.А., Тетерин П.Е., Федин О.Л., Шарикова Д.Р.	

## 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.), к экспериментам в области физики нейтрино и астрофизических экспериментах, программами радиобиологических исследований. Рассматривается возможность применения разрабатываемых методик и алгоритмов в рамках других перспективных проектов мегасайенс (CEPC, JUNO, 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  $450 \text{ фб}^{-1}$ .

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. Оптимизация работы моделей DCM и UrQMD 3.4. Попытка разработать модель кварк-глюонных струн для ядро-ядерных взаимодействий.

Физический анализ данных, полученных в экспериментах NICA MPD, NICA BM@N и NA61/SHINE, в рамках моделей Geant4 FTF и UrQMD 3.4. Массовые расчеты для указанных моделей по заявкам экспериментаторов.

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 переколяционной модели мультифрагментации.

Алгоритмы, программное обеспечение, Монте-Карло моделирование и анализ данных эксперимента CMS для исследования резонанса с массой 28 ГэВ в спектре пар мюонов на статистике Run 3 LHC. Поиск резонанса при 28 ГэВ в канале распада на пары  $e^+e^-$  и  $\tau^+\tau^-$  с использованием данных Run 2 и Run 3 LHC.

Алгоритмы, программное обеспечение, Монте-Карло моделирование и анализ данных эксперимента CMS для поиска частиц темной материи в данных Run 3 в конечном состоянии с двумя мюонами разного знака и недостающим импульсом. Интерпретация результатов в рамках Inert Doublet Model и в 2HDM+ $a$  моделей.

Отладка процедуры тестирования чувствительных элементов калориметра высокой гранулярности эксперимента CMS, включая реконструкцию треков и оценку эффективности каждой ячейки детектора. Проработка возможности мониторирования ячеек калориметра с помощью физических процессов.

Разработка и отладка алгоритмов и методов реконструкции траекторий мюонов в катодно-стриповых камерах (КСК) мюонной системы эксперимента CMS для сравнения непрерывного подхода вейвлет-анализа для разделения перекрывающихся сигналов с нейросетевым подходом на базе КАН сети, 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.

Участие в работах по модернизации пакета ATLAS Athena IOVDbSvc под CREST, адаптация сервиса EventIndexPicking под требования Production System Group, модификация TDAQ Resource manager в соответствии с заданиями системы ATLAS JIRA.

Исследование эффективности и скорости различных методов машинного обучения идентификации частиц в BM@N (mailto:BM@N).

Нахождения полного набора поправочных параметров для детекторов STS и GEM эксперимента BM@N (с учетом и без учета магнитных полей) и их программная реализация для актуальных конфигураций детекторов в 2025-2026 годах.

Подготовка детальной геометрии трековых детекторов для актуальной конфигурации установки девятого сеанса эксперимента BM@N. Подготовка алгоритмов моделирования реалистичных откликов для газовых и полупроводниковых детекторов гибридной трековой системы, а также алгоритмов реконструкции координат с микростриповыми плоскостями данных детекторов для обработки экспериментальных данных, собранных в 2025 году в рамках девятого сеанса эксперимента.

Алгоритмы моделирования откликов трековых детекторов эксперимента BM@N на основе генеративно-состязательных сетей (GAN). Алгоритмы восстановления пространственных координат в трековых детекторах с применением гибридного подхода на базе классических и квантовых нейронных сетей.

Исследование с помощью Монте-Карло моделирования многочастичных корреляций в pp-взаимодействиях при энергии пучков комплекса NICA 13 ГэВ, сравнение с теоретическими моделями.

Внедрение программы идентификации заряженных частиц в MPD на основе градиентного бустинга в MPDroot.

Проведение модернизации алгоритмов кластеризации и завершение интеграции трекера ACTS в глобальную реконструкцию треков в рамках программной оболочки MPDroot. Тестировка ACTS пользователями в условиях mass production.

Обновление внешних зависимостей MPDRoot и его адаптация к изменениям в используемых пакетах (GCC 15.x, GEANT4 11.4+, ROOT 6.38+, C++23). Завершение поддержки CentOS 7 и начало поддержки Alma Linux 10.x. Оценка возможности распространения пакета MPDRoot с использованием CVMFS на платформе macOS.

Разработка и внедрение нейросетевых алгоритмов для задач реконструкции событий в эксперименте SPD на ускорительном комплексе NICA.

Разработка и внедрение нейросетевых методов на базе сетей Колмогорова-Арнольда (KAN) для деконволюции многокомпонентных сигналов получаемых в физическом эксперименте.

Разработка алгоритмов на базе тензорных сетей для задачи реконструкции треков заряженных частиц в TPC MPD на ускорительном комплексе NICA.

Применение классических методов трекинга для построения и экстраполяции треков из TPC к системе ToF эксперимента MPD.

Развитие и поддержка эксплуатации информационных систем экспериментов BM@N и MPD для описания геометрии установок, конфигурации детекторов, процесса менеджмента. Создание прототипа системы BM@N Data Quality Assurance. Создание и внедрение системы MPD e-log. Участие в разработке онлайн системы DAQ MPD.

Исследование свойств алгоритмов реконструкции струй/кластеров адронов в условиях SPD. Изучение возможности наблюдения кластеров частиц в инклюзивном случае. Определение кинематики партонов жесткого процесса с применением алгоритмов машинного обучения.

Реализация модели обработки и хранения смоделированных данных эксперимента SPD, актуальной на 2025-2026 год. Интеграция промежуточного программного обеспечения и создаваемого на программной платформе Sampo прикладного ПО эксперимента SPD.

Функциональное тестирование и отладка компонентов и интерфейсов комплекса промежуточного программного обеспечения для системы предварительной обработки данных эксперимента SPD на программно-аппаратном прототипе кластера первичной обработки данных - 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, добавление новых процессов, системы учета запросов на обработку данных. Проработка вопросов безопасности, в частности, аутентификации и авторизации пользователей, политик доступа к данным эксперимента. Развитие средств мониторинга инфраструктуры, сервисов и процессов обработки данных. Разработка систем полу- и автоматического тестирования сервисов созданной распределенной вычислительной среды.

Оптимизация графов автоматизированной обработки данных Baikal-GVD для эффективного использования многопоточности в программах обработки.

Развитие программного обеспечения для обработки данных на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов ЮМО.

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

Моделирование апгрэйд версии прототипа ОЛВЭ-HERO для тестов на пучках ускорителей.

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

Дальнейшая оптимизация веб-приложения для фитирования экспериментальных данных: выбор наилучшей LLM-модели, разработка дополнительного интерфейса для пользователя, увеличение числа принимаемых форматов данных.

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

Развитие алгоритмического модуля на основе моделей глубокого обучения и объяснимых моделей искусственного интеллекта для задач анализа данных, получаемых с использованием тест-системы «Водный лабиринт Морриса» в экспериментах, направленных на изучение поведенческих реакций лабораторных животных, подверженных воздействию различных факторов.

Разработка алгоритмов на базе методов глубокого обучения и компьютерного зрения и создание веб-приложения для анализа данных, получаемых с использованием тест-системы «Открытое поле» в экспериментах по изучению влияния ионизирующего излучения и других факторов на биологические объекты.

Исследования в области повышения точности моделей классификации и детекции болезней растений. Оценка эффективности и применимости различных методов генерации синтетических изображений болезней растений.

Исследования в области прогнозирования загрязнения окружающей среды с использованием данных дистанционного зондирования земли и различных методов машинного обучения. Разработка нейросетевых методов калибровки мобильных платформ для оценки состояния чистоты воздуха.

Разработка новых вычислительных методов на основе универсального обратного преобразования Радона и создание программного обеспечения для улучшенного анализа данных компьютерной томографии.

Разработка алгоритмов восстановления спектра нейтронов по показаниям спектрометра Боннера на основе глубоких нейронных сетей с преобразованием входящих признаков. Создание прототипа веб-приложения.

Тестирование и доработка прототипа квантового нечеткого ПИД – регулятора и демонстрационного образца робота со встроенным прототипом самоорганизующегося регулятора. Тестирование в эксплуатационном режиме прототипа интеллектуальной системы управления криогенными системами для сверхпроводящих магнитов ускорительного комплекса НИКА в штатных и нештатных ситуациях на основе квантового координационного самоорганизующегося ПИД – регулятора. Доработка методологии разработанной структуры интеллектуальной системы управления ВЧ-станцией.

## 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., Бадреева Д.Р., Барашенков И.В., Башашин М.Б., Боголюбская А.А., Бордаг Л., 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., Кулабов Д.С., Лукьянин 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., Рахмонова А.Р., Рихвицкий В.С., Рогожин И.А., Сархадов И., Саха Б., Стрельцова О.И., Сюракшина Л.А., Тарасов О.В., Толочко Е.Н., Торосян А.Г., Тухлиев З.К., Хмелев А.В., Червяков А.М., Чулуунбаатар Г., Чулуунбаатар Х., Шарипов З.А., Юкарова 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., Мардыбан Е.В., Назмитдинов Р.Г., Попов Ю.В., 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., Ляпин И.Д., Попов Е.П.
ЛФВЭ	Бычков А.В., Никифоров Д.Н.
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 неодномерных 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:**

Развитие методов решения многомерных начально-краевых задач для квантового туннелирования в подбарьерных реакциях слияния тяжелых ионов и методов расчёта характеристик неупругого рассеяния быстрых электронов на атомах при больших переданных импульсах с учетом эффекта Мигдала.

Разработка конечно-элементных методов решения многомерных краевых задач, включая вычислительную схему решения шестимерных краевых задач для исследования квадрупольно-октупольных коллективных моделей атомного ядра.

Моделирование процессов передачи нуклонов и фрагментации ядер при взаимодействиях тяжелых ионов в диапазоне средних энергий в рамках транспортно-статистического подхода. Анализ на основе микроскопических моделей оптического потенциала экспериментальных данных по протон-ядерному рассеянию и по ядро-ядерным взаимодействиям для получения информации о структуре взаимодействующих ядер и изучения влияния ядерной среды на механизмы этих реакций.

Разработка алгоритмов высокой точности и методов их параллельной реализации для численного исследования уравнений движения, описывающих модели малочастичных систем.

Численное решение задач многочастичной квантовой механики в приложениях физики конденсированных сред методами тензорных сетей, в том числе гибридных, с внедрением нейросетевых технологий. Исследование на этой основе квантового магнетизма в низкоразмерных спиновых системах, неравновесной квантовой динамики изолированных и открытых электронных и магнитных квантовых систем.

Квантово-химический расчет электронной структуры и спиновых состояний металлорганических молекулярных магнетиков на основе переходных и редкоземельных металлов.

Исследование когерентных динамических явлений при бозонном переходе Раби-Джозефсона. Моделирование вероятностных динамических сетей с различными типами памяти.

Моделирование сложных процессов в материалах под действием облучения тяжелых ионами высоких энергий, нанокластерами и под действием лазерного облучения в рамках комбинированного подхода, объединяющего методы молекулярной динамики и модель термического пика.

Развитие методов высокопроизводительного численного исследования динамических процессов в джозефсоновских структурах различных типов. Моделирование динамики цепочки параллельных  $j_0$  переходов сверхпроводник–ферромагнетик–сверхпроводник, включая исследование резонансных свойств и возникновения магнонов в таких системах. Исследование интертипных сверхпроводников и сверхпроводников с примесями.

Проведение в рамках различных подходов численного анализа данных малоуглового рассеяния на везикулярных системах малого радиуса для получения новой информации о структуре и свойствах таких систем в зависимости от внешних факторов.

Исследование локализованных структур в системах, описываемых нелинейными динамическими уравнениями в одно- и многомерных моделях теории поля, включая движущиеся осциллоны, а также периодические решения уравнения Абловица – Ладика с нелинейной фазой.

Оптимизация метода и комплекса программ для расчета траекторий движения пучка частиц в изохронном циклотроне для ускорения расчета коэффициента прохождения пучка через ускоритель.

Сравнительный анализ различных сценариев конечно-элементного моделирования явления намагничивания массивного сверхпроводника  $MgB_2$  с использованием пакета COMSOL с целью выбора оптимального численного подхода.

Развитие, параллельная реализация и теоретическое обоснование безматричного  $h$ - $p$  полуадаптивного трёхуровневого итерационного метода циклов для решения конечно-элементных систем большой размерности на многоядерных компьютерах. Проведение расчетов по оптимизации характеристик сверхпроводящих магнитов на основе трехмерного компьютерного моделирования и метода объемных интегральных уравнений.

Оптимизация методов вычислений и модернизация программного пакета для параллельного компьютерного моделирования охлаждения нейтронных звёзд, а также для валидации моделей уравнения состояния сверхпроводящей сильно взаимодействующей ядерной материи по данным наблюдений компактных объектов. Изучение роли спинорного поля в ускоренном расширении Вселенной на основе решения самосогласованной системы уравнений Эйнштейна–Дирака и сравнение полученных численных результатов с данными наблюдений и известными теоретическими моделями.

Исследование моделей с нелокальным взаимодействием для описания спектров мезонов и развитие методов численного решения соответствующих систем уравнений, вычисление на этой основе физических характеристик изучаемых систем. Описание процессов рождения и диссоциации тяжелых кварковиев.

Реализация квантовой схемы алгоритма QAOA для 2х- и 3х-мерных вариантов модели Изинга с поперечным электрическим полем в среде Quda-Q. Реализация квантовой схемы нелокального гейта для создания в среде Cirq состояния двух кубитов с заданными характеристиками перепутанности на основе факторизации преобразований группы  $SU(4)$ , позволяющей строить двойной смежный класс  $SU(2) \times SU(2) \setminus SU(4) / U(1)^4$ .

Исследование проявлений отклонения квантовой системы от классической версии на основе совместного анализа отрицательности функции Вигнера для кутрита и характеристик перепутанности в системе двух кубитов.

Построение модели конечномерный квантовой системы на основе групп Вейля – Гейзенберга и Клиффорда с описанием квантовых состояний посредством дискретных функций Вигнера, определенных над полями Галуа.

Построение цепочек редукции функциональных соотношений для многопетлевых Фейнмановских интегралов с использованием комплекса программ в системе Maple.

Разработка алгоритма минимизации влияния помех окружающей среды и систематических экспериментальных ошибок на однокубитные логические вентили путем реализации определенной последовательности унитарных операций.

Реализация квантовых алгоритмов для отслеживания частиц с использованием библиотек qbsolv, neal и Google OR-tools для эффективной параллельной обработки в задачах QUBO. Решение задачи трекинга в формулировке QUBO с использованием квантово-инспирированного оптимизатора QIOPt, предназначенного для решения комбинаторных, целочисленных и смешанных оптимизационных задач.

Ускорение "model-building" и включение в алгоритмы трекинга улучшенной фильтрации ложных сегментов с целью уменьшения влияния шумовых помех при использовании наборов данных SPD.

Анализ зонной структуры и моделирование релаксации неравновесных носителей в смешанных сцинтилляционных кристаллах, перспективных для использования в детекторах ионизирующего излучения с помощью DFT пакета Quantum Espresso и вычислительных ресурсов суперкомпьютера ГОВОРУН.

#### Активность темы:

Наименование активности	Руководители	Сроки реализации
Лаборатория	Ответственные от лаборатории	Статус
1. 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      Бежанян Т.Ж., Войтишина Е.Н., Воронцов А.С., Дереновская О.Ю., Зуев М.И., Мажитова Е., Пелеванюк И.С.

УНЦ      Каманин Д.В.

Ассоциированный      Богданов А.В., Корхов В.В., Киямов Ж.У., Никольска А.Н.  
персонал

#### 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, включающую облачную инфраструктуру и гетерогенную вычислительную платформу HybriLIT.

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:**

Подготовка учебных курсов и реализация образовательной магистерской программы «Методы и технологии обработки данных в гетерогенных вычислительных средах» по направлению 01.04.02 Прикладная математика и информатика в Филиале Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова.

Проведение Универсиады «Ломоносов» для студентов вузов РФ и стран-участниц ОИЯИ в целях выявления и поддержки талантливой молодежи, привлечения студентов к поступлению в магистратуру Филиала МГУ в г. Дубне.

Проведение Школ по информационным технологиям ОИЯИ.

Подготовка высококвалифицированных специалистов для научных проектов, реализуемых в ОИЯИ, совместно с научными и образовательными организациями РФ и стран-участниц ОИЯИ.

Проведение учебных практик, научно-исследовательских семинаров по информационным технологиям для студентов РФ и стран-участниц ОИЯИ.

Развитие компонент экосистемы на базе МИВК ОИЯИ, включающего облачную инфраструктуру и гетерогенную вычислительную платформу HybriLIT, для реализации образовательных программ и информационной поддержки активности.

**Сотрудничество по теме 1119**

Страна или МО	Город, регион	Институт	Участники	Статус
Армения	Ереван, ER	ЕГУ	Тумасян А.	Соглашение
		ННЛА	Тумасян А.	Соглашение
			Айрапетян А.	Соглашение
			Геворкян А.	Соглашение
Беларусь	Гомель, НО	ГГУ	Андреев В.В.	Совместные работы
			Максименко Н.В.	Совместные работы
	Минск, МI	ИМ НАНБ	Малютин В.Б. + 2 чел.	Соглашение
			Килин С.Я.	Обмен визитами
		ИФ НАНБ	Килин С.Я.	Совместные работы
			Михалычев А.Б.	Обмен визитами
			Михалычев А.Б.	Совместные работы
			Прокопеня Н.О.	Обмен визитами
			Прокопеня Н.О.	Совместные работы
		НИИ ЯП БГУ	Ермак Д.В.	Обмен визитами
			Ермак Д.В.	Совместные работы
Болгария	София	SU	Макаренко В.В.	Совместные работы
			Макаренко В.В.	Обмен визитами
			Мосолов В.А.	Обмен визитами
			Мосолов В.А.	Совместные работы
			Димитров В.	Совместные работы
Великобритания	Оксфорд, OXF	Ун-т	Младенов Д.	Соглашение
			Христов И.Г.	Совместные работы
			Христова Р.Д.	Совместные работы
			Галлас Э.	Совместные работы
Вьетнам	Хошимин, SG	HCMUE	Лыонг Ле Хай	Совместные работы
Грузия	Тбилиси, TB	GTU	Гиоргадзе Г.	Совместные работы
			Элашвили А.	Совместные работы
		TSU	Гогилидзе С.	Совместные работы
Египет	Гиза, GZ	UG	Абдулмагаед И.	Совместные работы
Египет	Гиза, GZ	CU		Совместные работы

Страна или МО	Город, регион	Институт	Участники	Статус
Италия	Генуя, GE	INFN	Барберис Д.	Совместные работы
Казахстан	Алма-Ата, ALA	ИЯФ	Буртебаев Н.Т.	Совместные работы
			Сахиев С.К.	Совместные работы
		НИИ ЭТФ КазНУ	Еркинбаева Л.К.	Совместные работы
	Астана, AST	ЕНУ	Курмангалиева Ж.Д.	Совместные работы
Китай	Пекин, BJ	CIAE	Пэйвэй Вэн	Совместные работы
			Чэнцзянь Линь	Совместные работы
Мексика	Мехико, CDMX	UNAM	Айяла А.	Совместные работы
			Хесс П.О.	Совместные работы
Монголия	Улан-Батор	IMDT MAS	Батгэрэл Б.	Соглашение
		MUST	Улзийбаяр В.	Совместные работы
Россия	Владивосток, PRI	ДВФУ	Регузова А.В.	Соглашение
	Владикавказ, SE	СОГУ	Нартиков А.Г.	Соглашение
			Огоев А.У.	Соглашение
	Воронеж, VOR	ВГУ	Кургалин С.Д.	Совместные работы
	Гатчина, LEN	НИЦ КИ ПИЯФ	Ким В.Т.	Совместные работы
			Кирьянов А.К.	Совместные работы
	Дубна, MOS	ГУ "Дубна"	Деникин А.С.	Совместные работы
			Кирпичева Е.Ю.	Совместные работы
			Черемисина Е.Н.	Совместные работы
		Филиал МГУ	Боос Э.Э.	Совместные работы
			Ольшевский А.Г.	Совместные работы
	Москва, MOW	ВШЭ	Щур Л.Н.	Соглашение
			Деркач Д.А.	Соглашение
			Ратников Ф.Д.	Соглашение
		ИТЭФ	Гаврилов В.Б.	Совместные работы
		МГУ	Соколов И.А.	Совместные работы
			Смелянский Р.Л.	Совместные работы
			Сухомлин В.А.	Совместные работы
			Фомичев В.В.	Совместные работы
		МИСИС	Иванников А.Л.	Совместные работы
		МИФИ	Артамонов А.А.	Совместные работы
			Коротков М.Г.	Совместные работы
			Солдатов Е.Ю.	Совместные работы
			Черкасский А.И.	Совместные работы
		МЭИ	Тарасов А.Е.	Совместные работы
			Топорков В.В.	Совместные работы
		НИВЦ МГУ	Воеводин В.В.	Совместные работы
		НИИЯФ МГУ	Боос Э.	Совместные работы
			Дудко Л.В.	Совместные работы
			Петрушанко С.В.	Совместные работы
		РУДН	Бронников К.А.	Соглашение

Страна или МО	Город, регион	Институт	Участники	Статус
			Малых М.Д.	Соглашение
			Рыбаков Ю.П.	Соглашение
			Севастьянов Л.А.	Соглашение
		ФИАН	Данилов М.В.	Совместные работы
Петр.-Камчатский	КамГУ		Израпил Р.И.	Соглашение
Пущино, MOS	ИМПБ РАН		Лахно В.Д.	Совместные работы
Самара, SAM	СНИУ		Салеев В.А.	Совместные работы
			Баскаков А.В.	Совместные работы
Санкт-Петербург	СПбГУ		Богданов А.В.	Совместные работы
			Дегтярев А.Б.	Совместные работы
			Щеголева Н.Л.	Совместные работы
Саратов, SAR	СГУ		Дербов В.Л.	Совместные работы
Саров, NIZ	Филиал МГУ		Воеводин В.В.	Совместные работы
Тверь, TVE	ТвГУ		Цветков В.П.	Совместные работы
			Цветков И.В.	Совместные работы
			Чемарина Ю.В.	Совместные работы
Томск, ТОМ	ТГУ		Скорик Н.А.	Совместные работы
	ТПУ		Лидер А.	Соглашение
Троицк, MOW	ИЯИ РАН		Гниненко С.Н.	Совместные работы
Тула, TUL	ТулГУ		Сычугов А.А.	Совместные работы
			Французова Ю.В.	Совместные работы
Челябинск, СНЕ	ЮУрГУ		Соколинский Л.Б.	Совместные работы
Сербия	Белград, BG	UB	Деспотович С.	Совместные работы
			Хаджийойич М.	Совместные работы
			Чосич М.	Совместные работы
			Эрич К.	Совместные работы
Словакия	Кошице, KI	UPJS	Вала М.	Совместные работы
США	Арлингтон, TX	UTA	Озтурк Н.	Совместные работы
Таджикистан	Худжанд, SU	ХГУ	Хамдамов Ш.Д.	Совместные работы
Узбекистан	Ташкент, ТК	АН РУз	Мирзаев С.З.	Совместные работы
		ИЯФ АН РУз	Садыков И.И.	Совместные работы
		Физика-Солнце	Олимов Х.К.	Совместные работы
Франция	Жив-сюр-Иветт	Irfu	Формика А.	Совместные работы
ЦЕРН	Женева, CH	ЦЕРН	Аволио Дж.	Совместные работы
			Де Моншено Г.	Совместные работы
			Рибон А.	Совместные работы
			Рое Ш.	Совместные работы
ЮАР	Кейптаун, WC	UCT	Алексеева Н.	Совместные работы
			Дика А.	Совместные работы
	Сомерсет-Уэст, WC	iThemba LABS	Мокоена Т.Э.	Совместные работы
Япония	Сендай	IMRAM	Каная С.	Совместные работы
			Такахashi M.	Совместные работы