

## Лаборатория информационных технологий

Предложен новый алгоритм для представления полиномов в задачах вычисления инволютивных базисов и базисов Грёбнера систем нелинейных полиномиальных уравнений. В данном алгоритме все полиномы, которые необходимы для вычислений, представлены в виде единой таблицы, столбцы которой сопоставлены с мономами, в данный момент входящими в базис, а строки — с полиномами. В ячейках таблицы находятся коэффициенты при мономах в конкретном полиноме. Для обеспечения произвольного доступа по мономам и более простой работы с данными к таблице привязано несколько более сложных структур: связанный список мономов, отсортированных по убыванию согласно используемому упорядочению, задающий

соответствие между мономом и номером его столбца в таблице, хэш-таблица по ключу-моному, выдающему номер его столбца в таблице, и еще одна хэш-таблица, по номеру столбца выдающая моном, ему соответствующий. Такой структуры данных вполне достаточно для реализации алгоритма вычисления базиса.

Показано, что вычисления с таблицей можно частично перенести на GPU, что является, насколько известно автору, первым случаем GPU-ускоренного вычисления базиса Грёбнера. Вычисления на GPU с помощью данной структуры имеют меньше промахов кэша по сравнению с традиционными структурами данных, тесты показывают сравнимую скорость выполнения вычислений в большинстве случаев и большой выигрыш на некоторых примерах.

*Янович Д. А.* Вычисление инволютивных базисов и базисов Грёбнера, используя табличное представление полиномов // Программирование. 2020. Т. 46, № 2. С. 67–72.

Анализируется проблема квантово-механического описания околобарьерного слияния тяжелых ядер, происходящего в условиях сильной связи их относительного движения с поверхностными колебаниями. С этой целью предложен эффективный метод конечных элементов для численного решения системы связанных уравнений Шредингера с граничными услови-

(Slovakia), the Institute of Nuclear Physics of the Polish Academy of Sciences (Krakow, Poland), and EvoLogics GmbH (Berlin, Germany).

## Laboratory of Information Technologies

A new algorithm for representing polynomials in computations of involutive and Gröbner bases of systems of nonlinear polynomial equations is proposed. In this algorithm, all polynomials that are necessary for calculations are presented in the form of a unified table, the columns of which are assigned to monomials that are currently included in the basis, and the rows correspond to the polynomials. The table cells contain the coefficients of the monomials. To ensure random access to the coefficients of the polynomial by its monomials and to simplify the work with data, some more structures are added to this table: a linked list of monomials arranged in descending order of some ordering, each element of which is assigned to the index of its column in the table; a hash table that, given the key-monomial, produces the index of its column in the table and another hash table that, given the column index in the table, produces the corresponding monomial. Such

a data structure is enough to implement a basis calculation algorithm.

It is shown that calculations with a table can be partially transferred to GPU, which is, as far as the author knows, the first case of GPU-accelerated calculations of the Gröbner basis. Computations on CPU using this structure have fewer cache misses, compared to traditional data structures; tests show a comparable speed of calculations in most cases and a big gain in some examples.

*Yanovich D.* Computation of Involutive and Gröbner Bases Using a Tabular Representation of Polynomials // Program. Comput. Software. 2020. V. 46, No. 2. P. 67–72.

The problem of a quantum-mechanical description of a near-barrier fusion of heavy nuclei, which occurs at strong coupling of their relative motion to surface vibrations, is analyzed. To this end, an efficient finite-element method is proposed for numerically solving coupled Schrödinger equations with boundary conditions corresponding to total absorption. The method allows us to eliminate the instabilities in numerical solutions that appear at a large number of coupled channels in some reactions. To illustrate the validity of our approach, the results of the fusion cross

ями, соответствующими полному поглощению. Метод позволяет устранять неустойчивости в численных решениях, возникающие при большом количестве связанных каналов в некоторых реакциях. Чтобы проиллюстрировать обоснованность метода, результаты по сечениям слияния реакций  $^{64}\text{Ni} + ^{100}\text{Mo}$  и  $^{36}\text{S} + ^{48}\text{Ca}$  были пересмотрены. Полученные результаты замечательно согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Установлено, что можно воспроизвести экспериментальные данные с помощью потенциала Вудса–Саксона без введения отталкивающих ядер. Показано, что сечения слияния при глубоких суббарьерных энергиях чувствительны к профилю потенциального кармана.

*Wen P.W. et al. Near-Barrier Heavy-Ion Fusion: Role of Boundary Conditions in Coupling of Channels // Phys. Rev. C. 2020. V. 101. P. 014618.*

Разработан рабочий прототип геометрической базы данных (Geometry Database) для эксперимента BM@N проекта NICA. Основной целью этой базы данных является централизованное хранение геометрии BM@N, предоставление удобных средств для управления данными о геометрических модулях, сборке различных версий установки BM@N из мо-

дулей и дополнительных файлов. Разработанная информационная система включает в себя базу данных, интуитивный и компактный графический интерфейс, а также программный интерфейс в виде набора макросов. В данной разработке был применен опыт работы с Geometry Database для эксперимента CBM, а улучшения графического интерфейса были выполнены на основе требований пользователей BM@N. Прототип Geometry Database был введен в эксплуатацию.

*Akishina E. et al. Development of the Geometry Database for the BM@N Experiment of the NICA Project // Eur. Phys. J. Web of Conf., Conf. MMCP 2019. 2020. V. 226. 03001.*

На основе технологий MPI и OpenMP разработана параллельная реализация метода расчета вещественной части оптического ядро-ядерного потенциала в рамках микроскопической модели двойного фолдинга. Тестовые расчеты полного сечения реакции  $^6\text{He} + ^{28}\text{Si}$  при энергии 50 МэВ показывают, что оба метода вполне эффективны и обеспечивают более чем 20-кратное ускорение вычислений по сравнению с последовательным режимом счета. Расчеты выполнены на кластере HybriLIT Многофункционального информационно-вычислительного комплекса Лаборатории информационных технологий ОИЯИ. Пакет компью-

section of the  $^{64}\text{Ni} + ^{100}\text{Mo}$  and  $^{36}\text{S} + ^{48}\text{Ca}$  reactions have been re-examined. The obtained results demonstrate a remarkable agreement with the available experimental data. It is found that experimental data can be reproduced with the use of the Woods–Saxon potential, without introducing repulsive cores. It appears that fusion cross sections at deep sub-barrier energies are sensitive to the potential pocket profile.

*Wen P.W. et al. Near-Barrier Heavy-Ion Fusion: Role of Boundary Conditions in Coupling of Channels // Phys. Rev. C. 2020. V. 101. P. 014618.*

A workable prototype of the Geometry Database for the BM@N experiment of the NICA project has been developed. The main goal of the database is to provide a central storage of the BM@N geometries, convenient tools for managing its geometry modules, various software assembling versions of the BM@N setup from geometry modules and additional files. The developed information system includes a database, an intuitive and compact Graphical User Interface (GUI) and Application Programming Interface (API) tools as a set of ROOT macros. The experience of the Geometry Database design for the CBM experiment

has been applied to this development, and GUI improvements have been made on the basis of BM@N users' requirements. The Geometry Database prototype has been put into operation.

*Akishina E. et al. Development of the Geometry Database for the BM@N Experiment of the NICA Project // Eur. Phys. J. Web of Conf., Conf. MMCP 2019. 2020. V. 226. 03001.*

On the basis of MPI and OpenMP technologies, a parallel implementation of the method for calculating the real part of the nucleus–nucleus optical potential within the microscopic double-folding model has been developed. Test calculations of the total cross section of the  $^6\text{He} + ^{28}\text{Si}$  scattering at an energy of 50 MeV show that both techniques are quite efficient, with more than 20 times speedup of calculations in comparison with the serial mode. The calculations have been performed on the HybriLIT cluster of the Multifunctional Information and Computing Complex of the Laboratory of Information Technologies of JINR. The package of computer codes DFM-POTM, including the serial C++ code, the MPI code and the OpenMP code, is freely available at the JINRLIB library of JINR.

терных кодов DFM-POTM, включающий последовательный код на C++, MPI-код и OpenMP-код, передан для свободного доступа в библиотеку электронных программ JINRLIB ОИЯИ.

*Bashashin M., Zemlyanaya E., Lukyanov K. Double-Folding Nucleus–Nucleus Optical Potential: Parallel MPI and OpenMP Implementations // Eur. Phys. J. Web of Conf. EDP Sci. 2020. V.226. 02004.*