

**Лаборатория информационных технологий
им. М. Г. Мещерякова**

Проведены расчеты спектра вибрационно-ротационных связанных, метастабильных состояний и состояний рассеяния димера бериллия в основном $X_1\Sigma_g^+$ -состоянии. Задача решена с использованием потенциальных кривых и разработанного авторского программного пакета KANTBP 5M, реализующего метод Ньютона и метод конечных элементов высокого порядка точности. Впервые получен спектр ротационно-вибрационных метастабильных состояний димера бериллия с комплексными собственными

**Meshcheryakov Laboratory of Information
Technologies**

The spectrum of vibrational-rotational bound, metastable states and scattering states of the beryllium dimer in the ground $X_1\Sigma_g^+$ state was calculated. The problem was solved using potential curves and the authors' software package KANTBP 5M, which implements Newton's method and the high-accuracy finite element one. The spectrum of rotational-vibrational metastable states of the beryllium dimer with complex energy eigenvalues, as well as the spectrum of vibrational-rotational bound states, which is in good agreement with the results of other authors, was obtained for the first time. The existence of such metastable states is confirmed by calculating the

значениями энергии, а также спектр вибрационно-ротационных связанных состояний, согласующийся с результатами других авторов. Существование таких метастабильных состояний подтверждается расчетом соответствующих резонансных состояний рассеяния с вещественными энергиями. Полученные результаты могут послужить руководством для будущей высокоточной лазерной спектроскопии слабосвязанных и метастабильных состояний, а также рассеяния димера бериллия. Представленный подход, реализованный в виде комплекса программ, является полезным инструментом для исследования слабосвязанных состояний с собственными энергиями, близкими к порогу диссоциации, и процессов приповерхностной диффузии двухатомных молекул.

Дербов В.Л. и др. Спектр димера бериллия в основном $X_1\Sigma_g^+$ -состоянии // Журнал количественной спектроскопии и переноса излучения. 2021. Т. 262. С. 107529.

В ЛИТ в сотрудничестве с Брестским государственным университетом им. А.С.Пушкина (Белоруссия) разработаны и численно реализованы новые эффективные алгоритмы расчета нормированного моттовского дифференциального сечения рассеяния релятивистских электронов на кулоновском потенциа-

ле, а также расчета суммарной поправки Мотта–Блоха к формуле Бете для ионизационных потерь энергии тяжелыми ионами на основе предложенного представления точного сечения Мотта в терминах моттовских парциальных амплитуд. Проведено сопоставление полученных результатов с результатами расчетов другими точными и приближенными методами в широких диапазонах значений зарядового числа ядра иона $6 \leq Z \leq 114$, энергий электронов, угла их рассеяния и гамма-фактора $1 \lesssim \gamma \lesssim 10$. Показаны неприменимость известных приближенных методов расчета сечения для тяжелых элементов и предпочтительность использования разработанного алгоритма для расчета нормированного сечения Мотта в области высоких и средних энергий электронов. Получено согласие значений поправки Мотта–Блоха, найденных на основе указанного представления сечения, со значениями поправки Линдхарда–Соренсена к формуле Бете в рассматриваемых диапазонах γ и Z . Разработанные методы актуальны в плане проведения расчетов ионизационных потерь энергии тяжелыми ионами в веществе во многих областях ядерной физики, астрофизики и физики элементарных частиц.

corresponding resonance scattering states with real-value energies. The given results can serve as a guide for future high-precision laser spectroscopy of weakly bound, metastable and scattering states of the beryllium dimer. The presented approach, implemented in the form of a software package, provides a useful tool for studying weakly bound states with eigenenergies close to the dissociation threshold and processes of the near-surface diffusion of diatomic molecules.

Derbov V.L. et al. Spectrum of the Beryllium Dimer in the Ground $X_1\Sigma_g^+$ State // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. 2021. V. 262. P. 107529.

New efficient algorithms for calculating the normalized Mott scattering differential cross section of relativistic electrons by the Coulomb potential, as well as for calculating the total Mott–Bloch correction to the Bethe formula for heavy-ion ionization energy losses based on the proposed representation of the Mott exact cross section in terms of Mott partial amplitudes, were developed and numerically implemented at LIT in cooperation with Brest State University named after A. S. Pushkin (Belarus). The results were compared with the results of calculations by

other exact and approximate methods in wide ranges of the values of the ion nuclear charge number $6 \leq Z \leq 114$, the energies of electrons, their scattering angle and the gamma factor $1 \lesssim \gamma \lesssim 10$. The inapplicability of the known approximate methods for calculating the cross section of heavy elements and the preference of using the developed method for calculating the normalized Mott cross section in the region of high and medium electron energies were demonstrated. The agreement of the Mott–Bloch correction values, found on the basis of the indicated representation of the cross section, with the values of the Lindhard–Sørensen correction to the Bethe formula in the considered γ and Z ranges was obtained. The developed methods are relevant in terms of calculating heavy-ion ionization energy losses in many areas of nuclear physics, astrophysics and elementary particle physics.

Kats P.B., Halenka K.V., Voskresenskaya O.O. Normalized Mott Cross Section in Different Approaches // Phys. Part. Nucl. Lett. 2021. V. 18, No. 3; arXiv: 2007.03622;

Kats P.B., Halenka K.V., Voskresenskaya O.O. Comparison of the Mott–Bloch and Lindhard–Sørensen Corrections to the Bethe Formula at Moderately Relativistic Energies // Phys. Part. Nucl. Lett. 2021. V. 18, No. 3; arXiv: 2008.04819.

Kats P.B., Halenka K.V., Voskresenskaya O.O. Normalized Mott Cross Section in Different Approaches // Phys. Part. Nucl. Lett. 2021. V. 18, No. 3; arXiv:2007.03622;

Kats P.B., Halenka K.V., Voskresenskaya O.O. Comparison of the Mott–Bloch and Lindhard–Sørensen Corrections to the Bethe Formula at Moderately Relativistic Energies // Phys. Part. Nucl. Lett. 2021. V. 18, No. 3; arXiv:2008.04819.

Предложена математическая модель пандемии COVID-19, основанная на двухпараметрическом нелинейном обыкновенном дифференциальном уравнении первого порядка с запаздывающим аргументом по времени. Модель использует два параметра: время возможного распространения инфекции отдельным вирусоносителем и вероятность заражения здорового члена популяции при контакте с инфицированным в единицу времени. Параметры можно задавать как функции времени, что особенно важно при описании пандемии с несколькими пиками. Модель применима к любому сообществу (стране, городу и т. д.) и обеспечивает оптимальный баланс между адекватным описанием пандемии и относительной простотой для практических оценок. Примеры применения модели качественно согласуются с динамикой пандемии COVID-19. Дано сравнение предложенной модели с известной моделью SIR (Susceptible, Infected, Recovered).

Виницкий С.И. и др. Редуцированная модель SIR пандемии COVID-19 // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2021. Т. 61, № 3. С. 23–35.

Численно исследовано двумерное дифференциальное уравнение, описывающее движение директора нематического жидкого кристалла для случая переменного внешнего электрического поля. Численным моделированием подтверждено наличие обнаруженного ранее эффекта накопления. Проведено сравнение со случаем постоянного электрического поля, а также дано качественное сравнение с экспериментом. Построенная математическая модель явления позволяет предсказывать динамику процессов в жидких кристаллах. Анализ особенностей распространения квазиволноводных мод в жидкокристаллическом волноводе показал, что в случае динамических процессов могут наблюдаться такие эффекты, как обмен мощностью между связанными модами, вытекание мод, переизлучение мод в моды другого порядка и др. Полученные результаты важны для дальнейшего исследования динамических процессов внутри нестационарных жидкокристаллических слоев как с теоретической точки зрения для понимания кинетических процессов в жидких кристаллах, так и с практической — при организации и проведении экспериментальных исследований.

A mathematical model of the COVID-19 pandemic based on a two-parameter nonlinear ordinary differential equation of the first order with a time lag was proposed. The model uses two parameters, namely, the time of possible spread of the infection by an individual carrier and the probability of infecting a healthy member of the population upon contact with an infected person per unit of time. The parameters can be set as time functions, which is essentially important when describing a pandemic with multiple peaks. The model is applicable to any community (country, city, etc.) and provides an optimal balance between an adequate description of the pandemic and relative simplicity for practical assessments. The examples of the model application are in qualitative agreement with the dynamics of the COVID-19 pandemic. The proposed model is compared with the well-known SIR (Susceptible, Infected, Recovered) model.

Vinitsky S.I. et al. Reduced SIR Model of the COVID-19 Pandemic // J. Comp. Math. Math. Phys. 2021. V. 61, No. 3. P. 23–35 (in Russian).

A two-dimensional differential equation describing the motion of the director of a nematic liquid crystal

for the case of an alternating external electric field was investigated numerically. The presence of the previously discovered accumulation effect was confirmed by numerical modeling. A comparison with the case of a constant electric field was made, and a qualitative comparison with the experiment was given. The constructed mathematical model of the phenomenon allows predicting the dynamics of processes in liquid crystals. An analysis of the features of the propagation of quasi-waveguide modes in a liquid crystal waveguide showed that, in the case of dynamic processes, such effects as power exchange between coupled modes, leakage of modes, re-emission of modes into modes of a different order, etc., can be observed. The results obtained are essential for the further investigation of dynamic processes inside nonstationary liquid crystal layers, both from a theoretical point of view for understanding kinetic processes in liquid crystals and from a practical one when organizing and conducting experimental studies.

Ayriyan A.S. et al. Computer Simulation of the Pulse-Periodic Electric Field Effect on the 2D Director Orientation of a Nematic Liquid Crystal. Experimental Research of Multimode Nematic Liquid Crystal Waveguide // J. Radioelectron. 2021. No. 1. P. 1–14.

Айриян А. С. и др. Компьютерное моделирование влияния импульсно-периодического электрического поля на двумерную ориентацию нематического жидкого кристалла. Экспериментальное исследование многомодовых нематических жидкокристаллических волноводов // Журнал радиоэлектроники. 2021. № 1. С. 1–14.

Грид-сайты, осуществляющие поддержку экспериментов международного уровня, таких как ATLAS, CMS и т.д., обязаны соответствовать требованиям, предъявляемым к их программному обеспечению, и использовать актуальные версии операционных систем и промежуточного программного обеспечения. На сегодняшний день эксперимент ATLAS отказывается от использования грид-сервиса CREAM-CE, являющегося важнейшей составляющей грид-сайта, в связи с прекращением поддержки данного сервиса со стороны разработчиков и рекомендует всем грид-сайтам из своего пула переход на программные продукты HTCondor-CE и/или ARC-CE. В данной работе в рамках совместного проекта ОИЯИ–Азербайджан для грид-сайта AZ-IFAN Института физики НАН Азербайджана выполнена миграция грид-сервиса CREAM-CE на HTCondor-CE. Представлены наиболее важные детали установки и настройки HTCondor-CE. Проведен ряд тестов на работоспособность данного

грид-сервиса средствами мониторинга ATLAS и EGI (European Grid Infrastructure). Показано, что схема миграции грид-сервиса CREAM-CE на HTCondor-CE, предложенная авторами, вполне эффективна и может быть использована для грид-сайтов EGI и WLCG (Worldwide LHC Computing Grid).

Бондяков А. С. и др. Миграция грид-сервиса CREAM-CE на HTCondor-CE // Системный администратор. 2021. Т. 220, № 3.

Grid sites that support international experiments, such as ATLAS, CMS, etc., are obliged to comply with the requirements for their software and use the latest versions of operating systems and middleware. To date, the ATLAS experiment refuses to utilize the CREAM-CE grid service, which is a paramount component of the grid site, due to the termination of support for this site from developers and recommends all grid sites to switch to HTCondor-CE and/or ARC-CE software products. In this work, within the joint project of JINR and Azerbaijan, the migration of the CREAM-CE grid service to HTCondor-CE was performed for the AZ-IFAN grid site of the Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Azerbaijan. The most important details of the HTCondor-CE installation and configuration were presented. A number of tests for the operability of this grid site were carried out using the ATLAS and EGI (European Grid Infrastructure) monitoring tools. It is shown that the authors' migration scheme of the CREAM-CE grid service to HTCondor-CE is quite efficient and can be applied for the EGI and WLCG (Worldwide LHC Computing Grid) grid sites.

Bondyakov A. S. et al. Migration of the CREAM-CE Grid Service to HTCondor-CE // System Administrator. 2021. V. 220, No. 3 (in Russian).