

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

В последние десятилетия был сформулирован ряд свидетельств и мер неклассичности квантовых систем. Большинство из них основаны на принципиальной невозможности классического статистического описания квантовых систем. В частности, функция Вигнера обладает всеми свойствами правильного статистического распределения, за исключением свойства неотрицательности. С физической точки зрения положительность распределения вероятности является фундаментальным элементом классической статистической парадигмы. Следовательно, несуществование положительно определенных распределений вероятности служит некоторым индикатором неклассичности физической системы.

Функция Вигнера для конечномерных систем может быть составлена как дуальное произведение матрицы плотности и ядра Стратоновича–Вейля. В рамках подхода Кенфака и Жичковского рассмотрен индикатор неклассичности конечномерной квантовой системы, зависящей от объема отрицательной части функции Вигнера. Данный индикатор определяется над унитарно-неэквивалентными классами квантовых состояний, т. е. представляет собой инвариант, однако,

так как для заданного квантового состояния функция Вигнера не единственна, значение индикатора зависит от выбора представления функции Вигнера. С помощью явной параметризации пространства модулей функций Вигнера рассчитаны соответствующие индикаторы Кенфака–Жичковского (KZ-индикаторы) для трехуровневой системы с вырожденными унитарно-неэквивалентными ядрами Стратоновича–Вейля. Для случая кутрита проведенные расчеты выявляют три класса состояний: «абсолютно классические/квантовые» состояния с нулевым и ненулевым KZ-индикаторами для всех значений параметров модулей соответственно и «относительно квантовые/классические» состояния, классичность/квантовость которых чувствительна к представлению функции Вигнера. Так, все чистые состояния кутрита относятся к «абсолютно квантовым» состояниям.

*Abgaryan V., Khvedelidze A., Torosyan A. Kenfack–Życzkowski Indicator of Nonclassicality for Two Non-Equivalent Representations of Wigner Function of Qutrit // Phys. Lett. A. 2021. V. 412. P. 127591.*

Реализован подход к интерактивной визуализации данных для научных вычислений в рамках проблемно-ориентированного сервиса [saas.jinr.ru](https://saas.jinr.ru). Для интеграции визуализации данных в структуру Django

## Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies

Over the past decades, some evidence and measures of the nonclassicality of quantum systems have been formulated. Most of them are based on the primary impossibility of a classical statistical description of quantum systems. Particularly, the Wigner function possesses all the properties of a proper statistical distribution except for the non-negativity of the latter. From a physical point of view, the positiveness of probability distributions is a fundamental element of the classical statistical paradigm. Therefore, the non-existence of positive definite probability distributions serves as a certain indication of the nonclassicality of a physical system.

The Wigner function of a finite-dimensional system can be constructed via dual pairing of a density matrix with the Stratonovich–Weyl kernel. Following Kenfack and Życzkowski, we consider the indicator of the nonclassicality of a finite-dimensional quantum system, which depends on the volume of the negative part of the Wigner function. This indicator is defined over the unitary non-equivalent classes of quantum states, i.e., represents an invariant, but since for a given quantum system there

is no unique Wigner function, it turns out to be sensitive to the choice of representations for the Wigner function. Based on the explicit parameterization of the moduli space of the Wigner functions, we compute the corresponding Kenfack–Życzkowski (KZ) indicators of a 3-level system for degenerate, unitary non-equivalent Stratonovich–Weyl kernels. In the case of qutrit, our calculations reveal three classes of states: the “absolutely classical/quantum” states, which have zero and non-vanishing KZ indicators for all values of the moduli parameters correspondingly, and the “relatively quantum/classical” states whose classicality/quantumness is susceptible to a representation of the Wigner function. Herewith, all pure states of qutrit belong to the “absolutely quantum” states.

*Abgaryan V., Khvedelidze A., Torosyan A. Kenfack–Życzkowski Indicator of Nonclassicality for Two Non-Equivalent Representations of Wigner Function of Qutrit // Phys. Lett. A. 2021. V. 412. P. 127591.*

An approach to interactive data visualization for scientific computing is implemented within the [saas.jinr.ru](https://saas.jinr.ru) problem-oriented service. To integrate data visualization into the Django framework, Bokeh and Dask, as well as the JINR cloud for service scaling, are used. The application

использовались Vokeh и Dask, а также облако ОИИИ для масштабирования системы. Применение облачных технологий дает возможность динамически перераспределять нагрузку между виртуальными машинами, что позволяет контролировать баланс между эффективным использованием оборудования и удобством для конечных пользователей. Представленная архитектура, несмотря на ее простоту и ориентированность на небольшое число клиентов, обладает хорошим потенциалом масштабируемости, а полученная система визуализации данных показала производительность, достаточную для реального научного визуального анализа не очень больших наборов данных. Реализованы два режима просмотра графиков: стандартный и растеризованный, различающиеся по производительности и набору функций. Итоговая архитектура программного обеспечения и прикладные решения, а также некоторые оценки производительности могут быть использованы в качестве примера при разработке других научных приложений на основе облачной инфраструктуры.

*Balashov N., Kutovskiy N., Sokolov I. Data Visualization in Cloud Service for Scientific Computations // Mod. Inform. Technol. IT-Education. 2021. V. 17, No. 1. P. 109–115.*

Методом молекулярной динамики исследованы образцы меди, железа и никеля со структурой реаль-

ных кристаллов с заданными дефектами типа пор, облучаемые нанокластерами меди с энергией 1–100 эВ/атом. Моделирование и тестирование проводились с помощью модифицированного пакета LAMMPS, установленного на гетерогенном вычислительном кластере HybriLIT. В рамках численного моделирования исследовано влияние ударных волн на дефектные структуры типа пор в мишени. Получены пороговые энергии облучения нанокластерами меди, меняющие структуру дефекта в мишенях. Полученные результаты показывают большую устойчивость дефектов типа пор в железной мишени к воздействию ударной волны по сравнению с образцами меди и никеля.

*Шарипов З.А. и др. Моделирование облучения нанокластерами меди металлических мишеней с заданными дефектами структуры, имитирующими свойства реальных кристаллов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (в печати).*

of cloud technologies makes it possible to dynamically redistribute the load across virtual machines, which enables for controlling the balance between efficient hardware utilization and end-user experience. Despite its simplicity and focus on a small number of clients, the presented architecture possesses good scalability potential, and the resulting data visualization system has shown performance sufficient for a real scientific visual analysis of not very large datasets. Two modes of viewing charts, namely, standard and rasterized modes, which differ in performance and a set of functions, are implemented. The software architecture and applied solutions presented, as well as some performance considerations, can be used as an example when designing other cloud-native scientific applications.

*Balashov N., Kutovskiy N., Sokolov I. Data Visualization in Cloud Service for Scientific Computations // Mod. Inform. Technol. IT-Education. 2021. V. 17, No. 1. P. 109–115.*

The molecular dynamics method is used to study samples of copper, iron and nickel with the structure of real crystals with specified defects such as pores, irradiated by copper nanoclusters with an energy of 1–100 eV/atom. Modeling and testing are carried out using a modified LAMMPS package installed on the HybriLIT hetero-

geneous computing cluster. The effect of shock waves on defective structures of the pore type in the target is investigated within numerical modeling. Threshold irradiation energies of copper nanoclusters, which change the structure of the defect in the targets, are obtained. The results show a greater resistance of pore-type defects in an iron target to the impact of a shock wave in comparison with the samples of copper and nickel.

*Sharipov Z.A. et al. Simulation of the Irradiation of Metal Targets by Copper Nanoclusters with Specified Structural Defects That Simulate the Properties of Real Crystals // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. (in press).*