

Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова

В ЛИТ разработан и зарегистрирован в Росреестре программ для ЭВМ программный комплекс для создания цифровых двойников (ЦД) распределенных центров сбора, хранения и обработки данных (РЦОД). Уникальность данной программы в том, что создаваемые с ее помощью ЦД эффективно отслеживают работу РЦОД с точки зрения потоков данных и связанных с ними задач. Программный комплекс по созданию ЦД пока не имеет аналогов. Цифровой двойник РЦОД — это виртуальная копия центра обработки данных, которая показывает, как он работает при любом возможном сценарии. Особенно такие двойники пригодятся при построении, эксплуатации и совершенствовании вычислительных архитектур различного рода экспериментальных установок.

Кореньков В. В., Пряхина Д. И., Трофимов В. В. Программный комплекс для создания цифровых двойников распределенных центров сбора, хранения и обработки данных // Росреестр программ для ЭВМ. № 2023667305.

Сотрудники ЛИТ и ЛФВЭ продемонстрировали первые результаты в рамках исследования применения машинного обучения в задаче идентификации заря-

женных частиц в эксперименте MPD. Использовалась разновидность алгоритма градиентного бустинга на решающих деревьях, реализованная в библиотеке CatBoost. Осуществлено сравнение алгоритма машинного обучения с методом n-sigma, который в настоящее время реализован в программной среде MpdRoot. Эффективность идентификации частиц в диапазоне малых и больших импульсов ($p < 0,7$ ГэВ/с и $p > 1,5$ ГэВ/с) была выше у алгоритма градиентного бустинга. Полученные результаты показывают, что применение методов машинного обучения позволяет добиться более высокой точности идентификации заряженных частиц в эксперименте MPD. Проводимые исследования стали возможны благодаря вычислительным ресурсам гетерогенной платформы HybriLIT.

Papoyan V., Aparin A., Ayriyan A., Grigorian H., Korobitsin A., Mudrokh A. Machine Learning Application for Particle Identification in MPD // Phys. At. Nucl. 2023. V.86(5). P. 869–873.

Экспериментальные исследования двухчастичных азимутальных корреляций очень популярны сейчас в физике высоких энергий. Исследования дают в основном качественные, а не количественные результаты. Для получения количественных результатов предлагается новый метод исследования двухчастичных корреля-

Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies

A software complex for creating digital twins of distributed data acquisition, storage and processing centres (DDPCs) was developed at MLIT and registered in the Register of Russian Computer Programs. The uniqueness of this program is that the digital twins created with its help effectively monitor the DDPC functioning in terms of data flows and related tasks. The software complex for creating digital twins has no analogues yet. A DDPC digital twin is a virtual copy of a data centre that demonstrates how it operates under any possible scenario. Such twins will be especially useful in the construction, operation and enhancement of computing architectures of different kinds of experimental facilities.

Korenkov V.V., Priakhina D.I., Trofimov V.V. Software Complex for Creating Digital Twins of Distributed Data Acquisition, Storage and Processing Centers // Register of Russian Computer Programs. No. 2023667305.

MLIT researchers in collaboration with VBLHEP colleagues demonstrated the first results of machine learning

application to the charge particle identification problem in the MPD experiment. The categorical boosting (CatBoost) implementation of gradient boosting on decision trees was used. A comparison of the machine learning algorithm with the n-sigma method, which is currently implemented in the MpdRoot software environment, was made. Gradient boosting showed a better efficiency of particle identification in the case of small and large momentum values ($p < 0.7$ GeV/c and $p > 1.5$ GeV/c). The results demonstrate that machine learning methods are well suited to address the particle identification problem in the MPD experiment. The ongoing research became possible thanks to the computing resources of the HybriLIT Heterogeneous Platform.

Papoyan V., Aparin A., Ayriyan A., Grigorian H., Korobitsin A., Mudrokh A. Machine Learning Application for Particle Identification in MPD // Phys. At. Nucl. 2023. V.86(5). P. 869–873.

Experimental studies of two-particle azimuthal correlations are now highly popular in high-energy physics. The studies give mainly qualitative rather than quantitative results. To obtain quantitative results, a new method for studying two-particle transverse momentum (P_T) cor-

ляций поперечных импульсов (P_T) в мягких адронных взаимодействиях. Показано, что монте-карловские модели PYTHIA 6 и Geant4 FTF (FRITIOF) дают различные предсказания для предлагаемых корреляций в протон-протонных взаимодействиях. Корреляции связаны со швингеровским механизмом рождения частиц и могут быть изучены в текущих и будущих экспериментах в физике высоких энергий, в частности, на NICA.

Galoyan A., Ribon A., Uzhinsky V. Towards Study of Two-Particle P_T Correlations in Hadronic Interactions at NICA // MPDI Physics. 2023. V.5, No.3. P.823–831.

Проблема нахождения равновесных конфигураций одноименно заряженных частиц (ионов), индуцированных внешними электростатическими полями в планарных системах, представляет огромный интерес как для фундаментальных, так и для прикладных исследований. Представлены результаты численного анализа равновесных конфигураций отрицательно заряженных частиц (электронов), запертых в круговой области бесконечным внешним потенциалом на ее границе. Для поиска устойчивых конфигураций с минимальной энергией разработан гибридный вычислительный алгоритм. Основой алгоритма являются интерполяционные формулы, выведенные в результа-

те анализа равновесных конфигураций, полученных с помощью вариационного принципа минимума энергии для произвольного, но конечного числа частиц в циркулярной модели. Решения нелинейных уравнений данной модели позволяют предсказывать формирование структуры в виде колец (оболочек), заполненных электронами, число которых уменьшается при переходе от внешнего кольца к внутренним. Число колец зависит от полного числа заряженных частиц. Полученные интерполяционные формулы распределения полного числа электронов по кольцам используются в качестве начальных конфигураций для метода молекулярной динамики. Результаты демонстрируют более высокую эффективность метода классической молекулярной динамики при использовании интерполяционных формул по сравнению с алгоритмами, основанными на методах Монте-Карло и глобальной оптимизации. Предложенный метод позволяет на несколько порядков повысить скорость достижения устойчивой конфигурации с минимальной энергией для произвольно выбранного числа частиц в рассматриваемой системе по сравнению с классическим методом молекулярной динамики.

Никонов Э.Г., Назмитдинов Р.Г., Глуховцев П.И. О равновесных конфигурациях заряженных ионов в планарных

relations in soft hadronic interactions is proposed. It is shown that Monte Carlo models, namely, PYTHIA 6 and Geant4 FTF (FRITIOF), give different predictions for the correlations in proton–proton interactions. The correlations are connected with Schwinger’s mechanism of particle creation and can be studied in current and future high-energy physics experiments, in particular, at NICA.

Galoyan A., Ribon A., Uzhinsky V. Towards Study of Two-Particle P_T Correlations in Hadronic Interactions at NICA // MPDI Physics. 2023. V.5, No.3. P.823–831.

The problem of finding equilibrium configurations of one-component charged particles, induced by external electrostatic fields in planar systems, is of great interest for both fundamental and applied investigations. The results of a numerical analysis are presented for equilibrium configurations of charged particles (electrons), confined in a circular region by an infinite external potential at its boundary. Equilibrium configurations with minimal energy are searched by means of a hybrid numerical algorithm. The algorithm is based on interpolation formulas that are obtained from the analysis of equilibrium configurations for an arbitrary finite number of charged particles in a circular

model, provided by the variational principle. The solution of the nonlinear equations of the circular model yields the formation of a shell structure that is composed of the series of rings filled with electrons, the number of which decreases as one moves from the boundary ring to the central one. The number of rings depends on the total number of charged particles. The interpolation formulas provide initial configurations for molecular dynamics calculations. The results demonstrate a significant efficiency of applying the method of classical molecular dynamics when using the interpolation formulas in comparison with algorithms based on Monte Carlo methods and global optimization. This approach makes it possible to significantly increase the speed at which an equilibrium configuration with minimum energy is reached for an arbitrarily chosen number of particles in the system under consideration compared to the classical molecular dynamics method.

Nikonov E. G., Nazmitdinov R. G., Glukhovtsev P. I. On Equilibrium Configurations of Charged Ions in Planar Systems with Circular Symmetry // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2023. No. 2. P. 71–76.

системах с круговой симметрией // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2023. №2. С. 71–76.

Конечно-элементное моделирование трехмерных проблем магнитостатики с использованием магнитного векторного потенциала является одним из основных инструментов вычисления магнитных полей с высокой точностью, но может требовать значительных вычислительных ресурсов для решения проблем со сложной геометрией и нелинейными материалами в силу большого числа степеней свободы. Для уменьшения вычислительных затрат без потери точности в качестве альтернативы предлагается использовать комбинацию магнитных векторного и полного скалярного потенциалов, применяемых к проводящим и непроводящим подобластям решаемой задачи соответственно и связанных условиями сопряжения на общей границе раздела. Для корректности комбинированной формулировки в непроводящих подобластях строятся разрезы, обеспечивающие их односвязность. Подробно обсуждаются вариационные постановки задач с использованием как векторного потенциала, так и комбинации обоих потенциалов в методе конечных элементов. Сравнительный анализ численной эффективности обеих формулировок проиллюстрирован

на примерах конечно-элементного моделирования катушки Гельмгольца и дипольного магнита в среде COMSOL Multiphysics. Показано, что применение комбинированной формулировки позволяет добиться значительного уменьшения объема используемой памяти и сокращения времени вычислений при аналогичной точности обоих методов.

Chervyakov A. On Finite-Element Modeling of Large-Scale Magnetization Problems with Combined Magnetic Vector and Scalar Potentials. JINR Preprint E11-2023-37. Dubna, 2023.

The finite-element modeling of three-dimensional magnetostatic problems in terms of magnetic vector potential has proven to be one of the most efficient tools for calculating magnetic fields with high accuracy, but can become computationally expensive in the presence of complex geometries and nonlinear materials due to the substantial number of degrees of freedom. To achieve a similar quality of calculations at lower computational costs, it is proposed to use a combination of magnetic vector and total scalar potentials as an alternative to the magnetic vector potential formulation. The potentials are applied to the conducting and nonconducting parts of the problem domain, respectively, and coupled together across their common interfacing boundary. For nonconducting regions, thin cuts are constructed to ensure their simple connectedness and, therefore, the consistency of the mixed formulation. The implementation of both formulations in the finite-element method is discussed in detail. The numerical performance of finite-element modeling in terms of combined potentials is assessed against the magnetic vector potential formulation for two magnetization models, a Helmholtz coil and a dipole magnet in COMSOL Multiphysics. It is shown that the mixed formulation can

provide a substantial reduction in the computational cost as compared to its vector counterpart for a similar accuracy of both methods.

Chervyakov A. On Finite-Element Modeling of Large-Scale Magnetization Problems with Combined Magnetic Vector and Scalar Potentials. JINR Preprint E11-2023-37. Dubna, 2023.