

руемость, комплементарность к клеткам организма и малые размеры везикул.

В результате работы были определены основные структурные параметры: у везикул наблюдалось уменьшение радиуса  $R$  от начального значения  $\sim 150 \text{ \AA}$  до  $\sim 130 \text{ \AA}$  с увеличением концентрации системы, толщина липидного бислоя оставалась практически неизменной ( $\sim 46$  и  $\sim 49 \text{ \AA}$ ). Была проведена оценка максимального гидрофобного объема везикулы, в котором могут быть размещены водонерастворимые лекарственные соединения:  $7,45 \cdot 10^6 \text{ \AA}^3$  при наименьшей концентрации 20% и  $5,85 \cdot 10^6 \text{ \AA}^3$  при наибольшей концентрации 37,5%. Также была обнаружена зависимость разницы плотностей длин рассеяния фотонов между объемом раствора и внутренней областью везикул от концентрации, обусловленная неравномерным процессом растворения мальтозы, которая входит в состав ФТНС. По результатам работы была написана статья «Анализ структуры фосфолипидной транс-

портной наносистемы методом малоуглового рассеяния рентгеновских лучей», которая выйдет в журнале «Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования».

*Maslova V.A. et al. Analysis of the Structure of a Phospholipid Transport Nanosystem by Small-Angle X-Ray Scattering // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2024. V. 11, No. 4.*

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

На ресурсах экосистемы ML/DL/HPC гетерогенной платформы HybriLIT был развернут полигон для квантовых вычислений, предоставляющий возможность работы с симуляторами квантовых вычислений в двух режимах доступа: batch-режиме и веб-интерфейсе. Характеристики сервера позволяют проводить расчеты с использованием библиотек, поддерживаю-

Рис. 2. Экспериментальные данные, полученные на установке ДИКСИ. Кривые малоуглового рассеяния от везикул ФТНС при концентрации 25% (a), 31,25% (b), 37,5% (c). Черные точки — эксперимент, красная сплошная линия — расчетная кривая

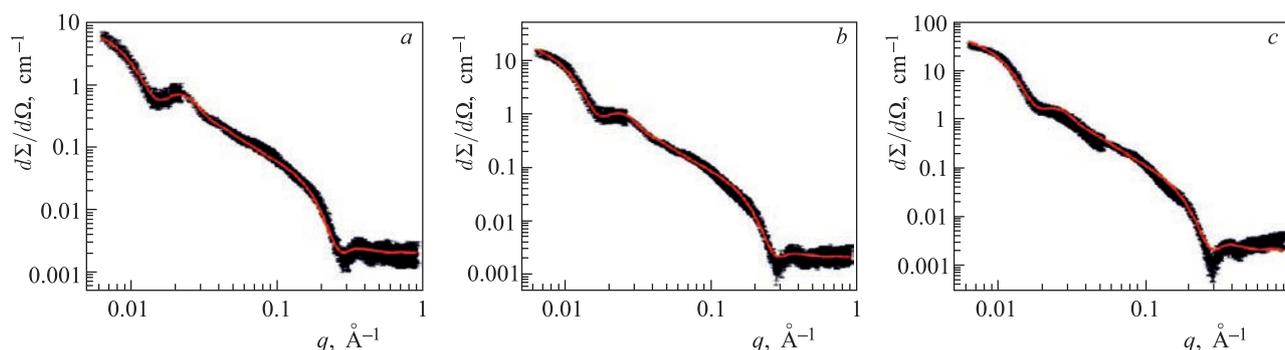


Fig. 2. Experimental data obtained at the DICSY facility. Small-angle scattering curves from PhTNS vesicles at a concentration of 25% (a), 31.25% (b), 37.5% (c). Black dots — experiment, red solid line — calculated curve

and  $5.85 \cdot 10^6 \text{ \AA}^3$  at the highest concentration of 37.5%. A water-insoluble drug can be placed in this volume. A dependence of the difference in the photon scattering length density between the volume of the solution and the internal region of the vesicles on concentration was also discovered. This difference is due to the uneven process of dissolution of maltose, which is part of PhTNS. Based on the results of the work, the article “Analysis of the Structure of a Phospholipid Transport Nanosystem by Small-Angle X-Ray Scattering” was written, which will be published in “Journal of Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques”.

*Maslova V.A. et al. Analysis of the Structure of a Phospholipid Transport Nanosystem by Small-Angle X-Ray Scattering // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2024. V. 11, No. 4.*

### Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies

A quantum computing polygon is deployed on the resources of the ML/DL/HPC ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform. It provides the possibility to work with quantum computing simulators in two access modes: batch mode and web interface. The server characteristics enable computations using libraries that support parallel computing on both central processors and graphics accelerators. The heterogeneous structure of the platform allows for quick changes in the characteristics of the polygon, adjusting it to the requirements of user tasks, adding servers with necessary computing components, in terms of both central processors and graphics accelerators. JupyterLab is chosen as the basis of the computing environment, which

щих параллельные вычисления на центральных процессорах и на графических ускорителях. Гетерогенная структура платформы позволяет оперативно изменять характеристики полигона, подстраивая его под требования задач пользователей, добавляя серверы с необходимыми вычислительными компонентами, в отношении как центральных процессоров, так и графических ускорителей. В качестве основы вычислительной среды выбран JupyterLab, что предоставляет возможность пользователям наглядно работать с квантовыми схемами и проводить расчеты в веб-браузере.

К настоящему времени установлены симуляторы квантовых вычислений Cirq, Qiskit, PennyLane, QuTiP. В качестве примера в работе приведены результаты расчетов задачи по поиску состояния с наименьшей энергией в модели Изинга с продольным магнитным полем с использованием квантового аппроксимационного оптимизационного алгоритма (QAOA). Показана зависимость эффективности проведения расчетов от конфигурации используемых вычислительных ресурсов. Запуск тестовой задачи показал возможность моделирования систем до 33 кубитов. Показано, что

Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова, март.  
Научная школа для учителей физики. Ознакомительная экскурсия в лабораторию



The Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies, March. Scientific School for Physics Teachers. An introductory tour of the laboratory

allows users to visually work with quantum circuits and perform computations in a web browser.

At present, Cirq, Qiskit, PennyLane and QuTiP quantum computing simulators are installed. As an example, the paper presents the results of computations of the problem of finding the state with the lowest energy in the Ising model with a longitudinal magnetic field using the quantum approximation optimization algorithm (QAOA). The dependence of the computation efficiency on the configuration of the computing resources used is demonstrated. Launching a test task shows the possibility

of simulating systems up to 33 qubits. It is indicated that the qsim high-performance quantum simulator enables a more efficient simulation of quantum circuits on classical and graphics processors of the quantum polygon.

*Belyakov D. V., Bogolubskaya A. A., Zuev M. I., Paliy Yu. G., Podgainy D. V., Streltsova O. I., Yanovich D. A.* Quantum Computing Polygon on the HybriLIT Heterogeneous Platform // Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems: Proc. of the All-Russian Conf. with Intern. Participation. Moscow, RUDN, 8–12 Apr. 2024. P. 303–309.

высокопроизводительный квантовый симулятор qsim позволяет более эффективно моделировать квантовые схемы на классических и графических процессорах квантового полигона.

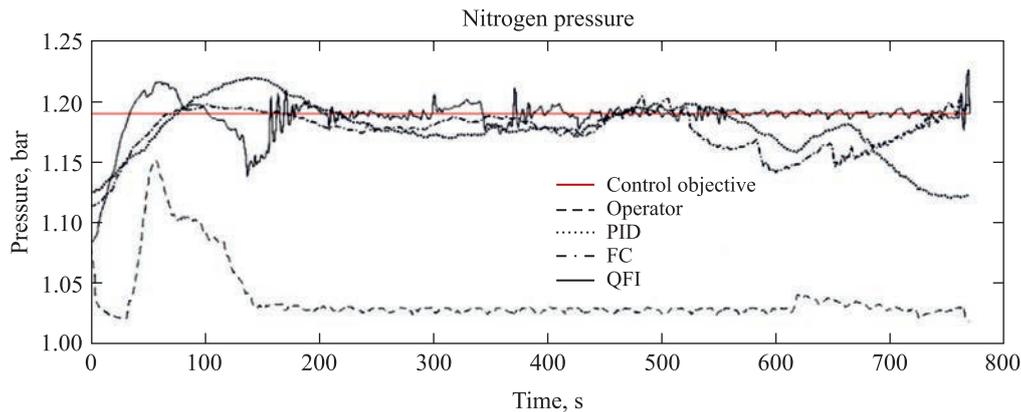
Беляков Д. В., Боголюбовская А. А., Зуев М. И., Палий Ю. Г., Подгайный Д. В., Стрельцова О. И., Янович Д. А. Полигон для квантовых вычислений на гетерогенной платформе NubriLIT // Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем: Материалы Всерос. конф. с междунар. участием, Москва, РУДН, 8–12 апр. 2024 г. М., 2024. С. 303–309.

Реализован процесс проектирования квантовой интеллектуальной системы управления с максимальным уровнем надежности и управляемости сложным объектом в условиях неопределенности исходной информации.

На примерах из робототехники и задачи стабилизации давления азота в криогенной системе испытательного стенда фабрики магнитов ЛФВЭ ОИЯИ показана эффективность использования встроенных

интеллектуальных систем управления, основанных на мягких вычислениях, генетических и квантовых алгоритмах. Результаты проведенной работы позволили: а) апробировать все этапы технологии проектирования встраиваемых интеллектуальных систем управления, б) в отсутствие модели системы использовать нейронечеткие системы, обученные на реальных физически измеряемых данных, в) использовать интеллектуальную систему управления в качестве надстройки над уже существующей системой управления (например системой TANGO), никак ее не меняя, но повышая при этом устойчивость и эффективность работы всей системы.

Новый этап развития технологии квантового интеллектуального управления предполагает значительное увеличение числа входных и выходных параметров. Рассмотрена возможность управления криогенной установкой бустера ускорительного комплекса NICA с помощью квантового интеллектуального регулятора на основе модели квантового нечеткого вывода, управляющего потоком азота в измерительном плече бустера, с использованием квантовой схемы на 30 кубитах.



Динамика установления целевого значения давления в системе в процессе заправки азота

Dynamics of setting the target pressure in the system during nitrogen filling

The process of designing a quantum intelligent control system (ICS) with the maximum level of reliability and controllability of a complex object under conditions of uncertainty of initial information is implemented.

Using examples from robotics and the task of nitrogen pressure stabilization in the cryogenic system of the test bench of the JINR VBLHEP magnet factory, the efficiency of employing a built-in ICS based on soft computing, genetic and quantum algorithms is shown. The results of the work carried out enabled us: a) to test all stages of the technology of designing an embedded ICS; b) in the absence of a system model, to use neuro-fuzzy systems trained on real physically measurable data; c) to use an ICS as an add-on to an existing control system (e.g., the TANGO system), without changing it in any way, but enhancing the stability and efficiency of the entire system.

A new stage in the development of quantum intelligent control technology involves a significant increase in the number of input and output parameters. The possibility of controlling the cryogenic booster plant of the NICA accelerator complex with the help of a quantum intelligent controller based on a model of quantum fuzzy inference for controlling the nitrogen flow in the measuring arm of the booster using a 30-qubit quantum circuit is considered. Quantum soft computing and quantum fuzzy inference are implemented on a classical processor and simulated on the Govorun supercomputer.

Zrelov P. V., Zrelova D. P., Katulin M. S., Korenkov V. V., Reshetnikov A. G., Ulyanov S. V. Quantum IT Engineering in the Tasks of Intelligent Control of Physical Systems // Part. Nucl. 2024. V. 55, iss. 3. P. 540–548.

Квантовые мягкие вычисления и квантовый нечеткий вывод реализованы на классическом процессоре и про- моделированы на суперкомпьютере «Говорун».

*Зрелов П.В., Зрелова Д.П., Катулин М.С., Кореньков В.В., Решетников А.Г., Ульянов С.В.* Квантовая IT-инженерия в задачах интеллектуального управления физическими системами // ЭЧАЯ. 2024. Т. 55, вып. 3. С. 540–548.

Для анализа научных публикаций с целью оценки качества, новизны, достоверности и актуальности проводимых исследований сегодня используются цифровые репозитории. Однако такие репозитории имеют множество ограничений, что делает актуальной систему автоматизированного сбора метаданных из различных источников, исключающего дублирование и необходимость ввода метаданных вручную.

Разработан программный комплекс, представляющий собой набор инструментов и программных мо-

дулей, для автоматизированного сбора информации, ее анализа, хранения и систематизации. Он включает в себя средства для обработки больших объемов данных, работы с базами данных и мн. др. Автоматизированный сбор метаданных публикаций позволяет автоматически собирать и структурировать информацию о публикациях, что облегчает поиск и использование информации. Кроме того, сбор информации о публикациях осуществляется быстрее и точнее, чем это можно сделать вручную. В настоящее время программный комплекс работает в режиме опытной эксплуатации в составе цифровой экосистемы ОИЯИ на открытой платформе цифровых репозитория DSspace.

*Кондратьев А.О., Бондяков А.С.* Автоматизированный сбор и систематизация публикаций // Открытые системы. 2024. Т. 1. С. 49–51.



Схема работы программного комплекса

Scheme of the software complex operation

Digital repositories are used today to analyze scientific publications in order to assess the quality, novelty, reliability and relevance of ongoing research. However, such repositories have many limitations, which makes a system for the automated collection of metadata from various sources relevant, eliminating duplication and the need to enter metadata manually.

A software package, i.e., a set of tools and software modules for automated collecting, analyzing, storing and systematizing information, is developed. It includes tools for processing large volumes of data, working with databases and much more. The automated collection of publi-

cation metadata allows information about publications to be automatically collected and structured, making the information easier to find and use. In addition, it enables one to collect information about publications faster and more accurately than it can be done manually. Currently, the software package operates in trial mode within the JINR Digital EcoSystem on the DSspace open platform of digital repositories.

*Kondratyev A. O., Bondyakov A. S.* Automated Collection and Systematization of Publications // Open Systems. 2024. V. 1. P. 49–51.

В статье рассматриваются особенности восстановления пространственных координат пролета заряженных частиц через плоскости трековых детекторов экспериментальной установки BM@N в конфигурации, спроектированной для первого физического сеанса эксперимента, проведенного в 2023–2024 гг. Приводятся основные этапы реконструкции координат, включающие в себя процедуры кластеризации сигнальных откликов на микростриповых плоскостях и нахождения координат пролета заряженных частиц по пересечениям активных стрипов. Также учитываются особенности формирования сигнала в конкретных типах детекторов, влияющие на эффективность реконструкции. Процедура реконструкции пространственных координат для детекторов с микростриповым съемом информации реализована в виде программного обеспечения, встроенного в среду BMNROOT, и используется для обработки экспериментальных данных, получаемых с координатных детекторов трековой системы эксперимента.

*Баранов Д.А.* Восстановление координат в микростриповых трековых детекторах для конфигурации первого физического сеанса эксперимента BM@N // ЭЧАЯ. 2024. Т. 55, вып. 3. С. 603–609.

The paper considers the peculiarities of the coordinate reconstruction of charged particles passed through the tracking detectors of the BM@N setup in the configuration designed for the first physics run conducted in 2023–2024. The main stages of the coordinate reconstruction, including procedures for clustering signal responses and finding the coordinates by crossing fired strips on microstrip readout planes, are described. The peculiarities of signal formation in specific types of detectors, which affect the reconstruction efficiency, are also taken into account. The procedure for reconstructing spatial coordinates for detectors with microstrip data acquisition is implemented in the form of software built into the BMNROOT environment and is used to process experimental data obtained from the coordinate detectors of the tracking system of the experiment.

*Baranov D.A.* Coordinate Reconstruction for Microstrip Tracking Detectors for the Configuration of the First Physics Run in the BM@N Experiment // Part. Nucl. 2024. V. 55, iss. 3. P. 603–609.

We propose new computational schemes and algorithms of the finite element method for solving elliptic multidimensional boundary value problems with variable

Представлены новые вычислительные схемы и алгоритмы метода конечных элементов для решения эллиптических многомерных краевых задач с переменными коэффициентами при производных в  $d$ -мерной области, направленные на описание коллективных моделей атомных ядер. Решение ищется в виде разложения по базису кусочно-полиномиальных функций, построенных в аналитическом виде путем объединения интерполяционных полиномов Эрмита и их производных на границах соседних конечных элементов —  $d$ -мерных параллелепипедов. Проанализированы расчеты спектра, квадрупольного момента и электрических переходов путем решения стандартных краевых задач для геометрической коллективной модели атомных ядер.

*Batgerel B., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Busa J., Jr., Blinkov Yu.A., Gusev A.A., Deveikis A., Chuluunbaatar G., Ulziibayar V.* Schemes of Finite Element Method for Solving Multidimensional Boundary Value Problems // J. Math. Sci. 2024. V. 279, No. 6. P. 738–755.

### Лаборатория радиационной биологии

В ЛРБ рассчитаны модели дозиметров высокоэнергетических нейтронов с одинаковыми гетерогенными (полиэтилен + свинец + кадмий) замедлителя-

coefficients at derivatives in a  $d$ -dimensional domain, aimed at describing collective models of atomic nuclei. The desired solution is sought in the form of an expansion in the basis of piecewise polynomial functions constructed in an analytical form by joining interpolation Hermitian polynomials and their derivatives on the boundaries of neighboring finite elements having the form of  $d$ -dimensional parallelepipeds. The calculations of the spectrum, quadrupole momentum and electric transitions of standard boundary value problems for the geometric collective model of atomic nuclei are analyzed.

*Batgerel B., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Busa J., Jr., Blinkov Yu.A., Gusev A.A., Deveikis A., Chuluunbaatar G., Ulziibayar V.* Schemes of Finite Element Method for Solving Multidimensional Boundary Value Problems // J. Math. Sci. 2024. V. 279, No. 6. P. 738–755.

### Laboratory of Radiation Biology

LRB's specialists have calculated models of high-energy neutron dosimeters with identical heterogeneous moderators (polyethylene + lead + cadmium), but different thermal neutron detectors: helium and boron counters (Fig. 1).