

Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова

Предложено обобщение известного метода параметризации положения репера в вещественном трехмерном пространстве с помощью углов Эйлера или, точнее, углов Тайта–Брайана.

Предлагаемый метод дает возможность параметризовать многообразие взаимно ортогональных подпространств произвольных размерностей многомерного унитарного пространства — другими словами, многообразие разбиений унитарного пространства на сумму взаимно ортогональных подпространств. Все эти многообразия параметризуются наборами «поворотов» в унитарных плоскостях, т. е. элементами группы $SU(2)$. В простейшем случае разбиения на два ортогональных подпространства это дает параметризацию алгебраически открытого подмножества грассманиана. Параметризация таких многообразий эквивалентна параметризации классов сопряженности унитарных матриц элементарными вращениями. Эта задача имеет множество приложений, особенно в квантовых вычислениях и квантовой теории информации.

Бабич М. В., Бордаг Л. А., Хведелидзе А. М., Младенов Д. М. О многомерных аналогах углов Эйлера (углов

Тайта–Брайана) и грассманианах // Зап. научн. сем. ПОМИ (принято к печати).

Для эксперимента SPD развернут прототип системы обработки и анализа данных. На подготовленной платформе в 2024 г. обрабатывались задачи Монте-Карло моделирования: сгенерировано 200 млн событий общим объемом 100 ТБ. В обработке участвуют ресурсы ОИЯИ и Петербургского института ядерной физики им. Б. П. Константинова (НИЦ КИ ПИЯФ). Продолжаются работы по созданию комплекса промежуточного программного обеспечения для SPD Online Filter. Реализована большая часть функциональных требований к программному комплексу, продолжаются работы по формализации и реализации нефункциональных требований. Совместно с коллегами из ЛЯП создан и введен в эксплуатацию стенд для разработки и отладки компонентов системы сбора данных установки SPD. Стенд предоставляет возможность проводить разработку и долговременные испытания программно-аппаратных комплексов и включает в себя «холодную зону» для размещения аппаратной части.

SPD Collab. Technical Design Report of the Spin Physics Detector at NICA. ArXiv:2404.0831.

Meshcheryakov Laboratory of Information Technologies

We present a generalization of the well-known Euler angles method or, more precisely, its modification suggested by Tait and Bryan, describing the rotation of an orthogonal frame in the real three-dimensional space.

The proposed method makes it possible to parameterize the manifold of mutually orthogonal subspaces of arbitrary dimensions, in other words, the manifold of partitions of a unitary space into a sum of mutually orthogonal subspaces. All these manifolds are parametrized by sets of “rotations” in unitary planes, i.e., by elements of the $SU(2)$ group. In the simplest case of partition into two orthogonal subspaces, this gives a parametrization of an algebraically open subset of a Grassmannian. The parametrization of such manifolds is equivalent to the parametrization of conjugacy classes of Hermitian matrices by elementary rotations. This problem has many applications, especially in quantum computing and quantum information theory.

Babich M. V., Bordag L. A., Khvedelidze A. M., Mladenov D. M. On Multidimensional Analogs of Euler (Tait–Bryan)

an) Angles and Grassmannians // Zap. Nauchn. Sem. POMI (in press).

A prototype of a data processing and analysis system was deployed for the SPD experiment. In 2024, Monte Carlo simulation tasks were processed on the platform: 200 million events with a volume of 100 TB were generated. The resources of JINR and Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute (NRC KI PNPI) are involved in the processing. Work on creating a middleware complex for SPD Online Filter is underway. Most of the functional requirements for the software complex were implemented, and work on formalizing and implementing non-functional requirements continues. Together with DLNP colleagues, a testbed for developing and debugging the components of the data acquisition system of the SPD facility was created and put into operation. The testbed provides the opportunity to perform the development and long-term tests of software and hardware complexes, and comprises a “cold zone” for placing hardware.

SPD Collab. Technical Design Report of the Spin Physics Detector at NICA. ArXiv:2404.0831.

Petrosyan A., Oleynik D., Zhemchugov A., Kiryanov A. SPD Offline Computing System // Phys. Part. Nucl. 2024. V. 55, No. 3. P. 450–452.

Получено высокоточное решение в заданной области электромагнитного устройства экспериментальной установки для изучения rot-эффектов при делении тяжелых ядер. Моделирование магнитного поля основано на известной формулировке задачи магнитостатики для двух скалярных потенциалов. С учетом особенностей конфигурации данного устройства и требования к уровню однородности магнитного поля дискретизация непрерывной задачи с помощью непрерывного метода Галёркина приводит к системам, размерности которых достигают $17 \cdot 10^6$. Для решения таких конечно-элементных систем с аппроксимацией высокого порядка разработан экономичный вариант безматричного метода предобусловленных сопряженных градиентов, который особенно эффективен для многоядерных компьютеров. При этом не требуется хранения 3D разреженной конечно-элементной матрицы и используются такие разбиения расчетной области на подобласти, при которых каждая подобласть состоит из элементов с одинаковой матрицей Якоби. В результате получена требуемая однородность магнитного поля на уровне 10^{-4} в объеме расположения ^3He спин-фильтра.

Petrosyan A., Oleynik D., Zhemchugov A., Kiryanov A. SPD Offline Computing System // Phys. Part. Nucl. 2024. V. 55, No. 3. P. 450–452.

A high-precision solution in a given region of the electromagnetic device of an experimental setup to study the ROT effects of the fission of heavy nuclei is obtained. Magnetic field modelling is based on the well-known formulation of the magnetostatics problem for two scalar potentials. Taking into account the peculiarities of the device geometry and the requirement for the level of magnetic field homogeneity, the discretization of the continuous problem by the continuous Galerkin method leads to systems with dimensions reaching $17 \cdot 10^6$. To solve such finite-element systems, a new economical version of the matrix-free preconditioned conjugate gradients method is proposed, which is especially effective for computing on multi-core computers. This does not require the storage of a 3D sparse finite-element matrix and uses such partitions of the calculated region into subregions, in which each subregion consists of elements with the same Jacobi matrix. As a result, the required homogeneity of the magnetic

Yuldasheva M. B., Yuldashev O. I., Novitsky V. V. Modelling Magnetic Field of a Compact Electro-Magnetic Device of Experimental Setup to Study ROT-Effects in Fission of Heavy Nuclei // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2025. V. 40, No. 2.

Развит кластерный метод квантово-химических вычислений параметров обменных взаимодействий с целью количественного обоснования эффективных спиновых моделей в сложных оксидах переходных металлов (ПМ) с незаполненными электронными *nd* оболочками ($n = 3, 4, 5$). В рассматриваемых соединениях при переходе к более тяжелым ПМ увеличивается радиальная протяженность *d*-орбиталей, что сопровождается ослаблением электрон-электронных взаимодействий внутри *d*-оболочек, но при этом усиливается релятивистское спин-орбитальное (СО) взаимодействие для *d*-электронов. Как следствие, меняется природа локального мультиплета электронной *d*-оболочки и магнитных моментов ПМ в узлах кристаллической решетки, что ведет к формированию сильно анизотропных экзотических обменных взаимодействий между ними. Реализация метода на примере сложных оксидов иридия с различной кристаллической структурой включает в себя анализ компас-модели Гейзенберга на квадратной решетке и модели Китаева на гексагональной решетке, предложенных

field at the level of 10^{-4} in the volume of the ^3He spin filter is obtained.

Yuldasheva M. B., Yuldashev O. I., Novitsky V. V. Modelling Magnetic Field of a Compact Electro-Magnetic Device of Experimental Setup to Study ROT-Effects in Fission of Heavy Nuclei // Russ. J. Numer. Anal. Math. Model. 2025. V. 40, No. 2.

A cluster method for the quantum-chemical calculations of exchange interaction parameters has been developed for the quantitative justification of effective spin models in complex transition metal (TM) oxides with open valence electron *nd* shells ($n = 3, 4, 5$). In these compounds, when moving to heavier TMs, the radial extension of *d* orbitals increases, which is accompanied by weakening of electron–electron interactions within *d* shells, while the relativistic spin–orbit (SO) interaction for *d* electrons enhances. As a consequence, the nature of local multiplets of *d* electrons and magnetic moments of TM ions at crystal lattice sites changes, which leads to the formation of highly anisotropic exotic exchange interactions between them. The application of the method to complex iridium oxides with different crystal structures includes the analysis of the Heisenberg compass model on a square lattice and the

ранее на феноменологической основе и интенсивно обсуждаемых в настоящее время. Полученные фазовые диаграммы на основе выведенных моделей для сложных оксидов иридия согласуются с результатами экспериментов и определяют область обменных параметров для поиска новых магнитных состояний.

Сюракишина Л. А., Юшанхай В. Ю. Анизотропные спиновые модели для оксидов иридия: обоснование в кластерном квантово-химическом подходе // Изв. РАН. Сер. физ. Материалы междунард. конф. «Magnetic Resonance — Current State and Future Perspectives (EPR-80)». Казань, 2024.

Kitaev model on a hexagonal lattice, which were proposed earlier on a phenomenological basis and are currently being intensively discussed. Within the derived models, the calculated phase diagrams for complex iridium oxides are consistent with experimental results and determine the range of exchange parameters to search for new magnetic states.

Siurakshina L. A., Yushankhai V. Yu. Anisotropic Spin Models for Iridium Oxides: Justification in the Cluster Quantum-Chemical Approach // Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. Proc. of the Intern. Conf. “Magnetic Resonance — Current State and Future Perspectives (EPR-80)”. Kazan, 2024.