

**Методы, алгоритмы и программное обеспечение для  
моделирования физических систем, математической обработки  
и анализа экспериментальных данных**

**(05-6-1119-2014/2023)**

**(Письменный отчет)**

Руководитель темы: Г. Адам, П. В. Зрелов

Заместители: Я. Буша, О. Чулуунбаатар

**Участвующие лаборатории ОИЯИ:** ЛИТ, ЛФВЭ, ЛТФ, ЛНФ, ЛЯР, ЛЯП, ЛРБ

**Участвующие страны и международные организации:**

Армения, Австралия, Азербайджан, Беларусь, Бельгия, Болгария, Бразилия,  
Великобритания, Венгрия, Вьетнам, Германия, Грузия, Израиль, Италия, Казахстан,  
Канада, Китай, Литва, Молдова, Монголия, Польша, Португалия, Россия, Румыния,  
Словакия, США, Таджикистан, Франция, ЦЕРН, Чехия, Швейцария, ЮАР, Япония

**Апрель, 2023**

# Содержание

<b>Расширенная аннотация</b>	3
<b>1. Математические и вычислительные методы моделирования сложных физических систем</b>	5
1.1. Избранные результаты моделирования магнитного поля	5
1.2. Численное моделирование физических систем и процессов	8
1.2.1. Теоретико-численные исследования плотной адронной материи, связанные с экспериментами на NICA	8
1.2.2. Численное моделирование ядерных систем и процессов	11
1.2.3. Численное моделирование систем конденсированного состояния	16
1.2.4. Численное моделирование кинетических высокоэнергетических процессов в материалах	20
1.2.5. Численное моделирование в радиационной биологии	22
1.2.6. Численное моделирование других систем	25
1.3. Новые способы снижения чрезмерной сложности внутренних задач	27
<b>2. Программные комплексы и математические методы для обработки и анализа экспериментальных данных</b>	30
2.1. Инструменты Parallel ROOT (PROOT) для анализа экспериментальных данных	30
2.2. Пакет GEANT4 для единого моделирования крупномасштабных экспериментальных данных	31
2.2.1. Обновление пакета GEANT4 новыми модулями	31
2.2.2. Использование пакета GEANT4 для обработки данных	32
2.3. Программная поддержка крупномасштабных экспериментов	33
2.3.1. Программная поддержка всех экспериментов ОИЯИ-NICA	33
2.3.2. Программная поддержка ОИЯИ-NICA: эксперимент BM@N	34
2.3.3. Программная поддержка ОИЯИ-NICA: эксперимент MPD	37
2.3.4. Программная поддержка LHC: эксперимент CMS	38
2.3.5. Программная поддержка LHC: эксперимент ATLAS	40
2.3.6. Программная поддержка FAIR: эксперимент CBM	42
2.3.7. Программная поддержка FAIR: эксперимент PANDA	42
2.4. Вычислительная поддержка внутренних проектов в физике конденсированного состояния и радиобиологических исследований	42
2.5. Вычислительная поддержка проектов ОИЯИ по физике конденсированного состояния	43
2.6. Программно-вычислительная поддержка проекта нейтринной физики Байкал–ГВД	45
2.7. Поддержка обработки и анализа данных экспериментальной ядерной физики	45
<b>3. Численные методы, алгоритмы и программы для многоядерных и гибридных архитектур и аналитика больших данных</b>	47
3.1. Экосистема ML/DL/HPC на вычислительной платформе HybriLIT	47
3.2. Разработки на основе Экосистемы ML/DL/HPC	49
3.2.1. Расширенные возможности использования экосистемы ML/DL/HPC на базе JupyterHub	49
3.2.2. Решения для экспериментов ОИЯИ на базе машинного обучения	50
3.2.3. Другие решения на основе экосистемы ML/DL/HPC	51
3.3. Реализация эффективных численных методов для трудно решаемых задач на платформах HybriLIT/GOVORUN	52
3.4. Достижения в аналитике больших данных	57
<b>4. Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений</b>	58
Повышение научной компетентности в использовании компьютерных средств ОИЯИ	62
<b>Список литературы</b>	64

## Расширенная аннотация

В настоящем отчете «Тема 1119» означает сокращенное название темы исследований ОИЯИ 05-6-1119-2014/2023, *“Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных”*,

Исследования, проведенные в рамках Темы 1119 в течение 2020–2023 гг., включают четыре вида деятельности, которые объединяют различные решаемые вопросы:

1. Математические и вычислительные методы моделирования сложных физических систем;
2. Программные комплексы и математические методы обработки и анализа экспериментальных данных;
3. Численные методы, алгоритмы и программное обеспечение для многоядерных и гибридных архитектур и аналитики больших данных;
4. Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений.

Письменный отчет о ходе работы по Теме 1119, сделанный на 52-й сессии Программно-консультативного комитета ОИЯИ по физике конденсированных сред (PAC-SMP) (02.07.2020) [1], свидетельствует о двух типах отличительных черт, которые выделяют эту Тему в исследованиях ОИЯИ.

Первый тип касается предпосылок (**входных** признаков) работы, проделанной в рамках данной темы:

– Работа проводится в тесном сотрудничестве с исследовательскими группами всех лабораторий ОИЯИ и институтов стран-участниц ОИЯИ. Это предполагает использование имеющегося опыта сотрудников ЛИТ для решения сложных задач в более чем 40 проектах ОИЯИ, требующих перспективных исследований в области вычислительной математики и физики, направленных на создание новых математических методов и алгоритмов для численных или символично-численных решений задач, возникающих в исследованиях экспериментальной и теоретической физики, их реализации в программных комплексах. Эта тематика включает в себя широкий спектр утвержденных к завершению в ОИЯИ в семилетнем периоде 2017–2023 гг. исследований по физике высоких энергий, ядерной физике, физике конденсированного состояния и наноструктур, биофизике, информационным технологиям, решение которых неотделимо от использования вычислений. Такими темами, имеющими первостепенное значение в ОИЯИ, являются проекты на базе NICA, нейтринная программа, физика сверхтяжелых и экзотических ядер, исследования на нейтронах ИБР-2. Из 272 ссылок, приведенных в конце настоящего отчета, 135 (т.е. 50%) выполнены в рамках международного сотрудничества.

*Подавляющая часть остальных названий создается в сотрудничестве с другими лабораториями ОИЯИ.*

– Продвижение и поддержка научной среды в ЛИТ, которая поощряет и вознаграждает *глубокий и обширный профессиональный опыт* в четырех важнейших направлениях: мышление ученого-компьютерщика с несколькими вычислительными парадигмами; экспертное знание математических задач, лежащих в основе темы сотрудничества; глубокое понимание тем численного анализа, позволяющее добиться снижения сложности, устойчивости и надежности разработанных алгоритмов; глубокое знание физической стороны рассматриваемой проблемы как обязательное условие серьезных работ по математическому моделированию. Руководство Темы 1119 приложило большие усилия для поддержки согласованного сотрудничества в крупномасштабных проектах рабочих групп, комплементарность знаний членов которых обеспечивает охват всех четырех упомянутых критических направлений. Внутри экосистемы ОИЯИ мы в значительной степени полагаемся на решения дирекции ОИЯИ и программно-консультативных комитетов.

– К сожалению, в 2020–2023 годах не все было гладко. Пандемия Covid-19 заставила нас на время существенно изменить форму (место и стиль) научной работы. В то время как более 90 процентов сотрудников ЛИТ, привлеченных к решению задач Темы 1119, были переведены на дистанционную работу, темпы научной работы оставались на высоком уровне. На первый план вышли новые формы общения, такие как научные вебинары, и мы были вынуждены отложить до лучших времен очные встречи на наших традиционных конференциях, семинарах и школах. Однако мы заплатили самую высокую цену человеческими жизнями. Особенно тяжела утрата профессора Владимира Петровича Гердта [2], многолетнего бессменного популяризатора и лидера исследований в области компьютерной алгебры и квантовых вычислений.

Второй тип характеристик выделяет *результаты Темы 1119* в рамках исследований ОИЯИ. Резолюция 52-й сессии ПКК-КС/СС (см. [3], стр. 5 и [4], стр. 6) полностью одобрила пять видов достижений, о которых сообщалось на этой сессии, и рекомендовала их дальнейшее развитие, а именно:

- (i) Вклад в широкомасштабное развитие исследований ОИЯИ;*
- (ii) продвижение к решению конкретных задач сотрудничества в рамках исследовательских проектов проводимых ОИЯИ;*
- iii) пакеты программного обеспечения, реализованные в универсальных вычислительных библиотеках;*
- (iv) вклад ОИЯИ в мировую исследовательскую среду;*
- (v) повышение научной компетентности в использовании компьютерных средств ОИЯИ.*

Эти пять показателей качества позволяют подробно охарактеризовать многогранную работу, сделанную в рамках Темы 1119. Они свидетельствуют о своевременности и важности различных достижений. Тщательный анализ прогресса, достигнутого в рамках Темы 1119 в течение 2020–2023 гг., раскрывает следующий вид с высоты птичьего полета вдоль этих линий:

**(i) Проектирование, разработка, внедрение и обслуживание удобной для пользователя среды** на гетерогенной вычислительной платформе HybriLIT, включающей суперкомпьютер «Говорун», является нашим основным вкладом в успех проекта МИВК

(многофункционального информационно-вычислительного комплекса) и через него к жизненно необходимым крупномасштабным вычислениям в ОИЯИ.

(ii) Примерами повышения квалификации персонала ЛИТ по Теме 1119 в области вычислений и обработки данных, являются: крайне необходимый и ценный вклад в трехмерное моделирование, требуемый аттестацией магнитов для будущей установки NICA; решение конкретных задач, поставленных в рамках BM@N и MPD в NICA; существенный вклад в разработку программного обеспечения, в рамках вклада ОИЯИ, для проектов CMS и ATLAS Phase 3 в ЦЕРН; разработка программного обеспечения системы обработки данных для проекта Байкал–ГВД; заметное увеличение нашего опыта в обработке данных и т.д.

(iii) Разработка и внедрение программных пакетов, предназначенных для крупных проектов (BM@NRoot, MPDRoot, CMSROOT, Geant4) или вычислительных библиотек общего назначения (9 пакетов в JINRLIB, 3 пакета в библиотеке CPC) являются доказательством нашей неизменной престижности, основанной одновременно на глубоком понимании правильных вычислительных парадигм и формулировании прорывных идей.

(iv) За период, охватываемый настоящим анализом, в престижных международных журналах сотрудники Темы 1119 стали соавторами 384 научных статьи (266 в иностранных, 118 в российских журналах), а также 19 монографий или вкладов в монографии. Соавторство в 217 научных статьях проекта CMS, 38 научных статьях проекта «Байкал–ГВД» завершает список научных работ, выполненных сотрудниками Темы 1119. Презентация 40 пленарных или приглашенных лекций на международных конференциях завершает статистику вклада в развитие ОИЯИ посредством публикаций.

(v) Специфическим, особенно важным аспектом деятельности значительной части персонала Темы 1119 было смягчение резкой кривой обучения, связанного с использованием крупномасштабных вычислений. В этом отношении, помимо личной помощи лицом к лицу через беседы, особенно важной была организация специальных мероприятий и/или участие в них в качестве лекторов.

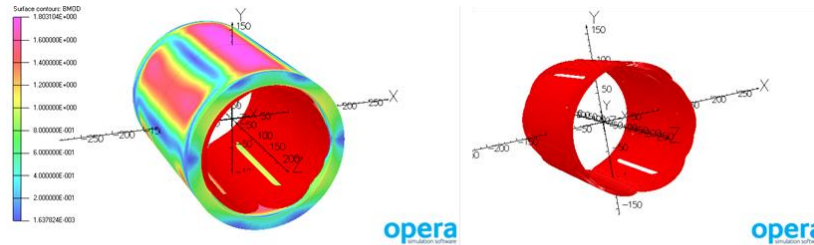
## **1. Математические и вычислительные методы моделирования сложных физических систем**

### **1.1. Избранные результаты моделирования магнитного поля**

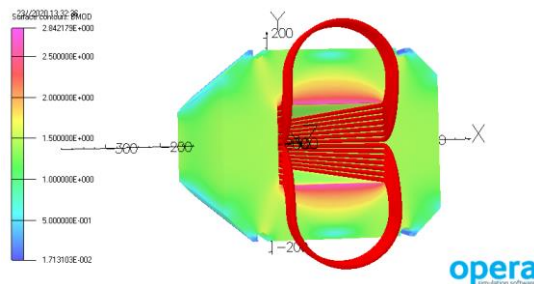
*Интенсивные текущие исследования включают **трехмерное компьютерное моделирование магнитных систем** в рамках проектов NICA (ОИЯИ) и FAIR (GSI) для проверки однородности магнитного поля в рабочих зонах новых физических магнитов; **3D моделирование экранирующего дипольного магнита CBM на FAIR с учетом модификаций, предложенных в концепции эксперимента CBM в вариантах MUCH и RICH; совершенствование средств проектирования новых циклотронов медицинского назначения.***

- **Использование OPERA для трехмерного моделирования магнитных систем для коллайдера NICA**

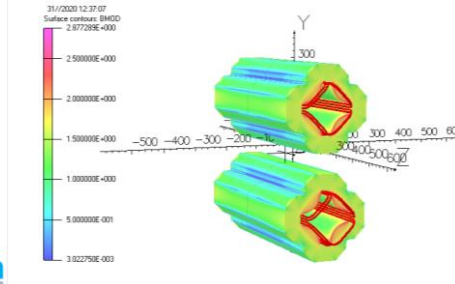
Работа, выполненная П.Г. Акишиным в сотрудничестве с ЛФВЭ в рамках проектов NICA по трехмерному моделированию разных классов магнитов иллюстрируется на рисунках ниже, где показано распределение поля в рабочих зонах магнита.



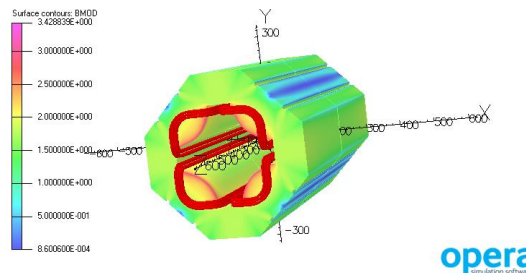
NICA Collider Multipole Corrector Modeling



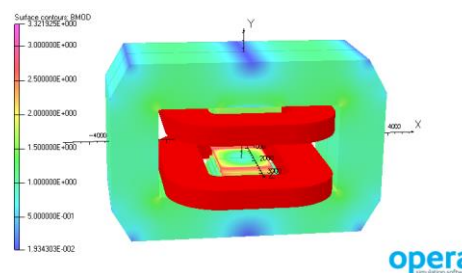
The vertical output dipole (NICA)



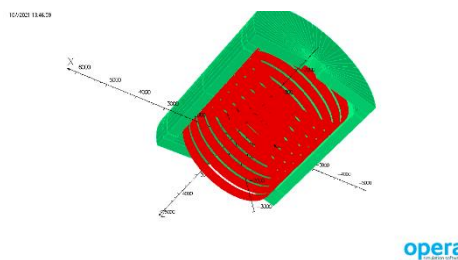
The collider quadrupole magnet model (NICA)



The final focus lens model (NICA)

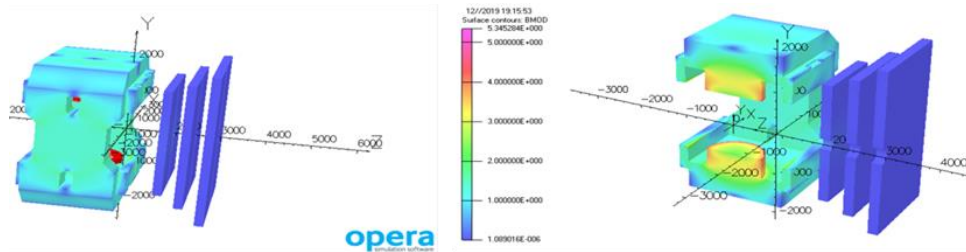


The Opera3d SP41 magnet model (BMN)

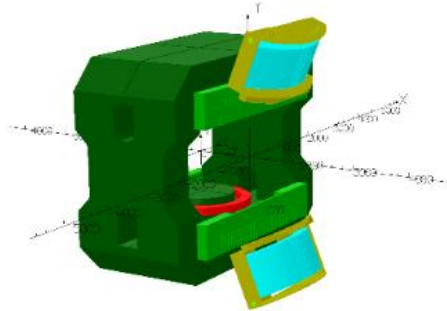


The solenoid SPD magnet model

- **Моделирование дипольного магнита CBM в GSI [5,6].** Модификации, предложенные в концепции эксперимента CBM, такие как включение обнаружения мюонов, потребовали создания дипольных магнитов с экранированием. П. Акишин реализовал моделирование магнита в двух возможных вариантах (MUCH и RICH). Трехмерное моделирование магнитной системы показано ниже.



The CBM dipole magnet system modeling. MUON option



The CBM dipole magnet for RICH option (FAIR)

Основные результаты, изложенные в [7] показали, что:

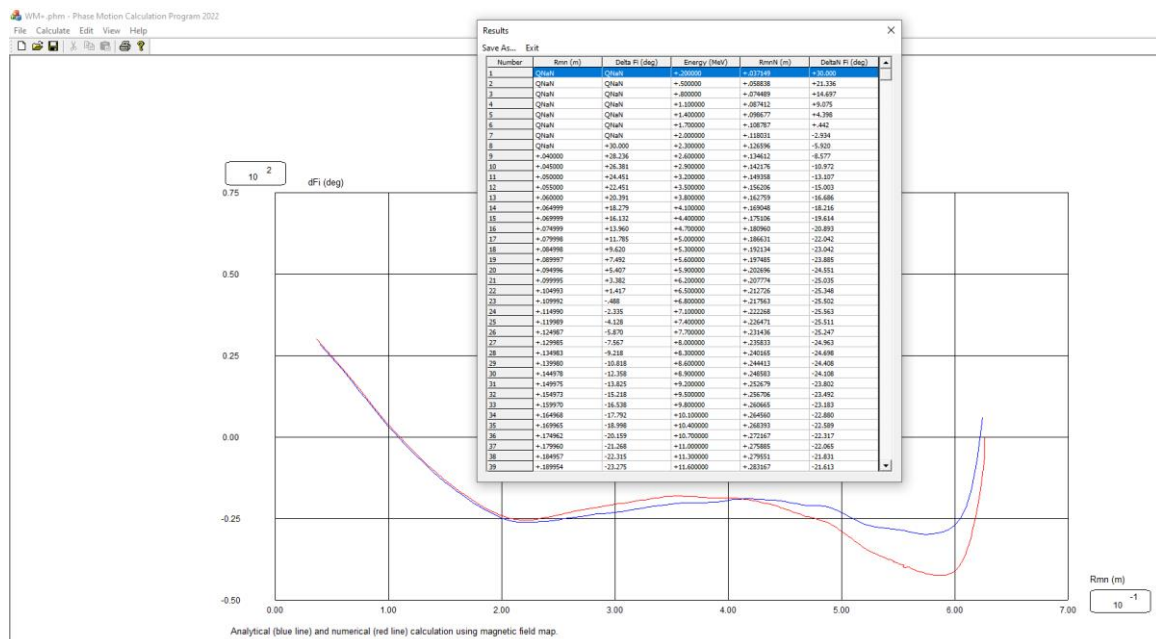
- Магнит CBM с ламинированным ярмом и полюсами значительно увеличивает значение поля рассеяния вблизи фотодетектора RICH.
- Конструкция экранирующего бокса с «крылом» и задней стенкой позволяет снизить величину магнитного поля рассеяния в  $\sim 1,8$  раз. Оптимизация расположения «крыла» требует систематического моделирования на заднем плане.

• **Совершенствование средств проектирования циклотронов медицинского назначения**

Исследования, проведенные совместно с коллегами из ЛЯП и Польши, привели к численному теоретическому определению рабочего режима высокого разрешения для многоцелевого изохронного циклотрона AIC-144 (ИЯФ ПАС, Краков, Польша) с параметрами точности, превышающими лучшую известную мировую точность [8]. На рисунке ниже представлена выдержка из полученных данных.

Важный параллельный пакет высокопроизводительных вычислений, дизайн и реализация которого были основаны на исследовании [8], включен в библиотеку программ JINRLIB:

- **EORP 2020** – Equilibrium Orbit Research Program [9] – программа расчёта замкнутых равновесных орбит в магнитных полях изохронного циклотрона путем решения уравнений движения (6-ое апреля 2020).



Фазовое движение: основной режим работы многоцелевого изохронного циклотрона АИС-144 (ИЯФ ПАС, Краков, Польша). Эксперимент 13.12.2019:  $p$ ,  $Fr_f = 26,26$  МГц,  $E_k = 60,7$  МэВ,  $K_{ext} = 30 \pm 5$  %.

Работа, направленная на концептуальную разработку нового циклотрона медицинского назначения SC230 в ЛЯП, потребовала нескольких связанных разработок в ЛИТ.

Одна из них касалась внедрения улучшенных специализированных модулей пакета COMSOL Multiphysics®, позволяющих как улучшить решение задач, связанных с магнитостатикой, так и эффективно использовать их в рамках гетерогенной платформы HybriLIT [10].

Концептуальный дизайн предлагаемого SC230, как компактного сверхпроводящего изохронного циклотрона для протонной терапии, требует решения комбинированных задач динамического анализа, включающих как магнитное, так и электрическое поля. Были решены два вида основных задач [11].

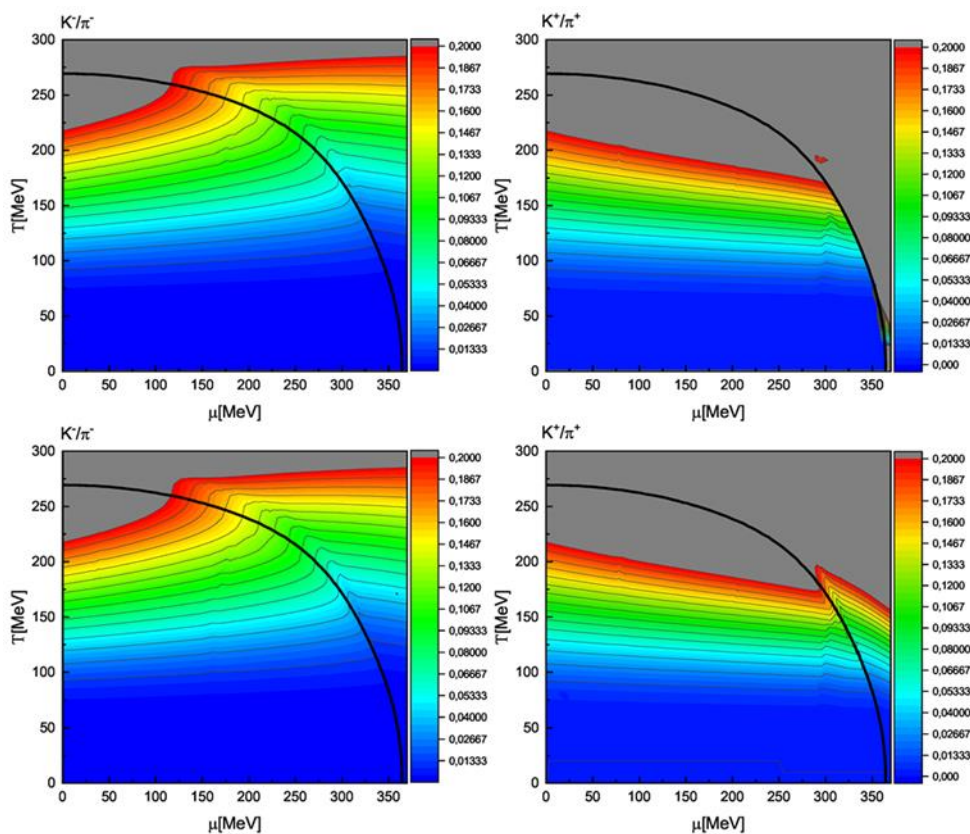
## 1.2. Численное моделирование физических систем и процессов

### 1.2.1. Теоретико-численные исследования плотной адронной материи, связанные с экспериментами на NICA

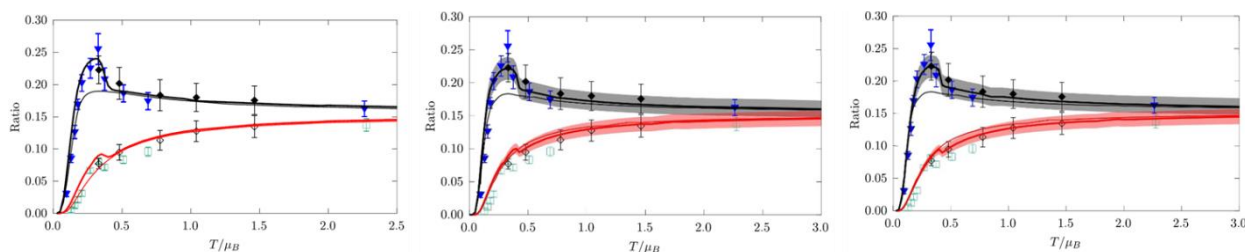
Проведен теоретический и численный анализ имеющихся экспериментальных данных по столкновениям тяжелых ионов в диапазоне энергий коллайдера NICA с акцентом на особенности ядерных взаимодействий в наблюдаемых характеристиках.

- Исследования «эффекта рога» в различных моделях на основе PNJL [12–16].
- Подход Бета–Уленбека [12,13] показывает, что с точки зрения фазовых сдвигов в канале  $K^+$ , поскольку массы кварковых составляющих различны, в качестве связанного состояния в среде могла появиться дополнительная низкоэнергетическая мода.





Отношение  $K^-/\pi^-$  и  $K^+/\pi^+$  в плоскости  $T-\mu_q$ . Две верхние панели соответствуют полным фазовым сдвигам, а две нижние панели показывают фазовые сдвиги при удалении аномальной моды. Показан только интервал соотношений, релевантных для сравнения с экспериментальными данными [13].



Зависимость отношений  $K^+/\pi^+$  (черные линии) и  $K^-/\pi^-$  (красные линии) от  $T/\mu_B$  вдоль линии химического вымораживания. *Левая панель:* для модели PNJL+ $g_V$  в подходе BU. *Центральная панель:* для EPNJL+ $g_V$ . *Правая панель:* для модели EPNJL. Заштрихованная область соответствует изменению подгонки  $\mu_\pi$  к данным RHIC и LHC с их полосой неопределенности при высоких значениях  $T/\mu_B$  [15].

- **Вычисление ширины затухания пиона в горячем ядерном веществе**, с учетом всех возможных мод пион-пионного рассеяния, выполнено на кластере HybriLIT с использованием нового алгоритма и кода C++ для расчета многомерных интегралов столкновений на основе метода Монте-Карло [17–20].

- **Предложения по экспериментам с использованием Spin Physics Detector (SPD) и перспективы первого этапа программы SPD на установке NICA** [21].

- **Адронные модификации в плотной барионной материи**

Проведено моделирование, описывающее структуру адронов в рамках сильно-коррелированной кварковой модели (Strongly Correlated Quark Model). Показано, как свойства мезонов и барионов могут изменяться в плотной ядерной среде: нуклоны преобразуются в дельта-изобары, гипероны и их возбужденные состояния, а мезоны рождаются преимущественно через векторные резонансы. Кроме того, свойства векторных мезонов, состоящих из легких кварков, изменяются кардинально: ширина распада растет, а значение массы падает. Подобные модификации в ядерной среде, особенно в диапазоне энергий мегасайенс проекта NICA, могут приводить к таким наблюдаемым эффектам, как

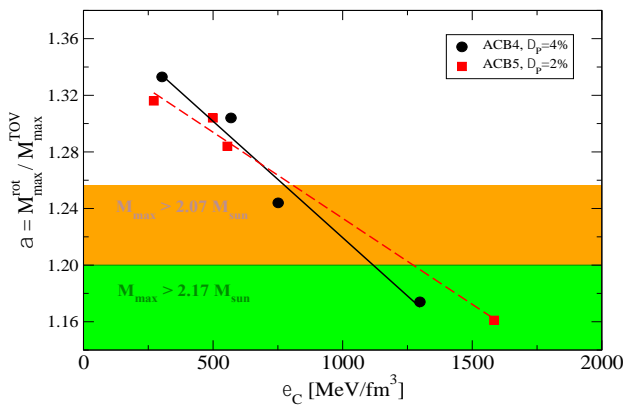
усиление странности, «эффект рога» и усиление дилептонных инвариантных спектров масс в диапазоне 0,2–0,7 ГэВ [22].

- Изучен вызванный аккрецией коллапс компактных звезд третьего семейства как триггер для эксцентричных орбит миллисекундных пульсаров в двойных системах и астрофизические аспекты звезд-близнецов общей релятивистской массы [23,24].

- Изучение сильно взаимодействующей ядерной материи с помощью расширенной модели сигма-омега было продолжено с помощью байесовского анализа современных данных наблюдений многоканальной астрономии [25,26].

- **Возможный альтернативный механизм появления GW170817** был исследован на основе байесовского анализа, позволяющего выбрать наиболее вероятное уравнение состояния (УС) при наборе ограничений физики компактных звезд [27].

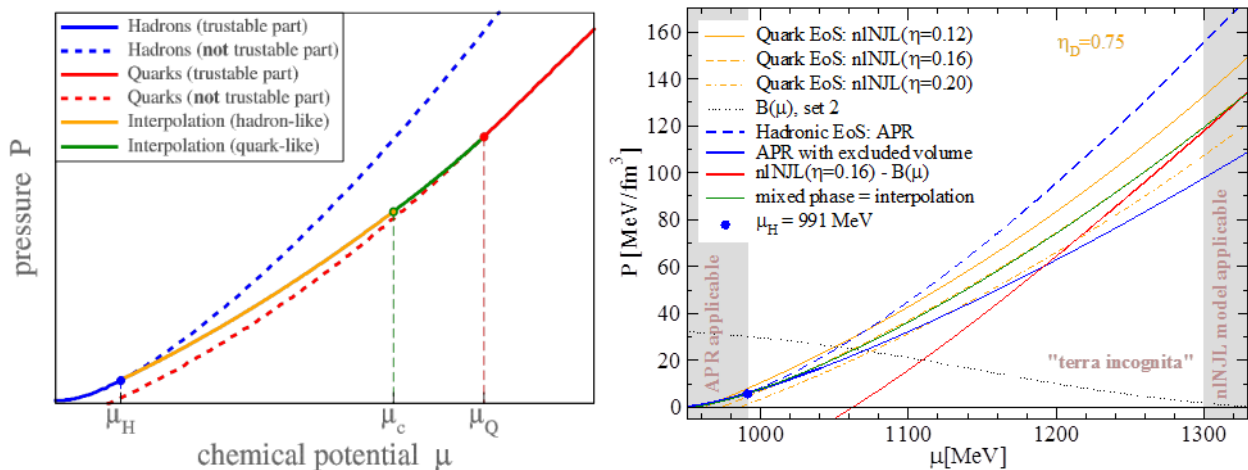
- **Ограничения для уравнения состояния плотной материи**, связанного с наблюдением слияния двойных нейтронных звезд GW170817, были получены в [24]. Установлено соотношение между максимальными массами наиболее быстро вращающихся компактных звезд и статических конфигураций в зависимости от плотности центральной энергии компактных звездных конфигураций.



Зависимость отношения между максимальными массами компактных звезд быстровращающейся и статической конфигураций от центральной плотности энергии компактных звезд для двух различных моделей уравнения состояния ядерной материи, ACB4 и ACB5, имеющих сильный фазовый переход и допускающих компактные звезды третьего семейства.

- **Байесовский анализ данных мультимессенджера M-R с интерполированным гибридным уравнением состояния** [28]

Разработана новая термодинамически согласованная двухзонная интерполяционная конструкция для получения гибридного УС для звездного ядерного вещества. Это позволяет систематически изучать гибридное УС, даже когда адронная и кварковая фазы не имеют точки равновесия (невозможна разумная конструкция Максвелла). Конструкция реализует плавный кроссоверный переход между обеими фазами за счет предположения, что природа перехода представляет собой смешение фаз.



Левая панель: гибридное УС, которое объединяет мягкое ядерное УС с более жестким УС кварковой материи путем интерполяции в промежуточной области между  $\mu_H$  и  $\mu_Q$  для  $n(\mu_H) = n_0$  и  $n(\mu_Q) = 2,5..5 n_0$ . Пунктирные кривые показывают места, где экстраполяции УС ядерной и кварковой материи становятся ненадежными.

Правая панель: давление в зависимости от химического потенциала для УС nINJL (оранжевые линии) по сравнению с УС APR (пунктирная синяя линия) показывает, что никакая разумная конструкция Максвелла невозможна. Когда нуклонный исключенный объем применяется к APR (сплошная синяя линия) и зависящему от плотности мешочному давлению  $B(\mu)$  (черная пунктирная линия) УС кварковой материи, получается точка перехода Максвелла и конструкция смешанной фазы (зеленая сплошная линия) может быть выполнена, что будет соответствовать интерполяции между APR и nINJL.

Возможную микрофизическую основу построения двухзонной интерполяции можно рассматривать как сокращение, заменяющее три микрофизических эффекта:

- 1) ужесточение ядерного УС из-за эффектов кварковой субструктуры (блокировка кварка Паули, моделируемая, например, объемом, исключенным из барионов),
- 2) смягчение УС кварковой материи при низких плотностях из-за ограничивающих эффектов (моделируемых, например, зависящим от среды давлением в мешке) и
- 3) смешанные фазовые эффекты за счет возникновения структур конечного размера (паста-фаз).

- Обнаружено, что **моделирование эволюции нейтронных звезд** посредством испускания нейтрино и фотонов, выполненное в рамках экзотической модели, включающей долю легкой темной материи (Light Dark Matter – LDM), приводит к схемам охлаждения, которые могут быть искажены присутствием LDM [29].

► **Химическое вымораживание легких ядер в ядерных столкновениях высоких энергий [30,31]**

### 1.2.2. Численное моделирование ядерных систем и процессов

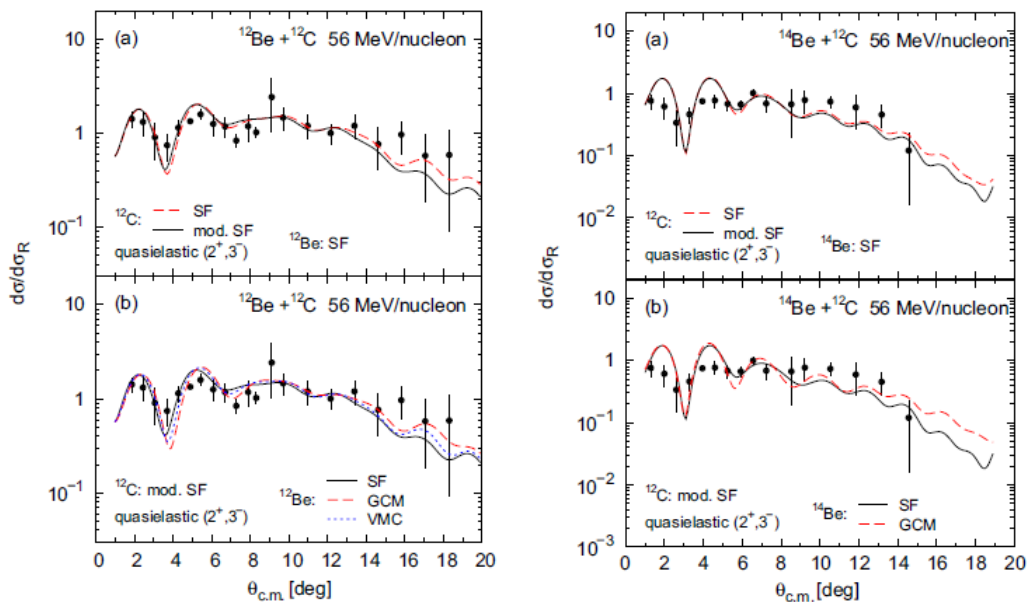
Вклад в мировые приоритеты ОИЯИ в области ядерной физики низких энергий осуществляется в рамках тройственного усилия, способного повысить ценность существующих дополнительных знаний: в ЛЯР – экспериментальные исследования, посвященные созданию и изучению новых сверхтяжелых элементов и экзотических ядер; в ЛТФ – формулирование теоретических моделей и гипотез, способных обеспечить понимание экспериментальных данных и предложить новые направления исследований; в ЛИТ – разработка и внедрение новых высокопроизводительных вычислительных пакетов, способных обеспечить детальные и эффективные математические решения моделируемых процессов. Описание результатов по математическому моделированию ядерных систем и процессов приведено в настоящем разделе. Разработка пакетов,

направленных на обеспечение точных и эффективных решений возникающих математических задач, рассматривается в главе 3.

► Прорыв, сделанный благодаря эффективной компьютерной реализации сформулированной модели микроскопического оптического потенциала в коллаборации ЛТФ и ЛИТ, позволил провести детальные численные исследования (на суперкомпьютере «Говорун»), отложенные в течение десятилетий, ранее измеренных процессов нуклон-нуклонного и пион-нуклонного рассеяния.

- Выполнен численный анализ [32–35] дифференциальных сечений упругого рассеяния экзотических ядер  $^{12,14}\text{Be}$  на углеродной и протонной мишенях при энергиях 56 МэВ/нуклон и 700 МэВ соответственно. Исследовано влияние неупругого канала и выбора модели плотности распределения нуклонов в ядрах  $^{12,14}\text{Be}$  на согласие с экспериментальными данными.

Для плотности ядер  $^{12,14}\text{Be}$  в форме симметризованной функции Ферми получены параметры, улучшающие согласие дифференциальных сечений рассеяния  $^{12,14}\text{Be} + ^{12}\text{C}$  с экспериментальными данными. Комбинированный комплекс программ для ЭВМ на языках C++/Fortran, созданный для этой цели с использованием методов параллельного программирования MPI и OpenMP, обеспечивает сокращение времени вычислений в 5 раз при расчетах на кластере HybriLIT МИВК МЛИТ.



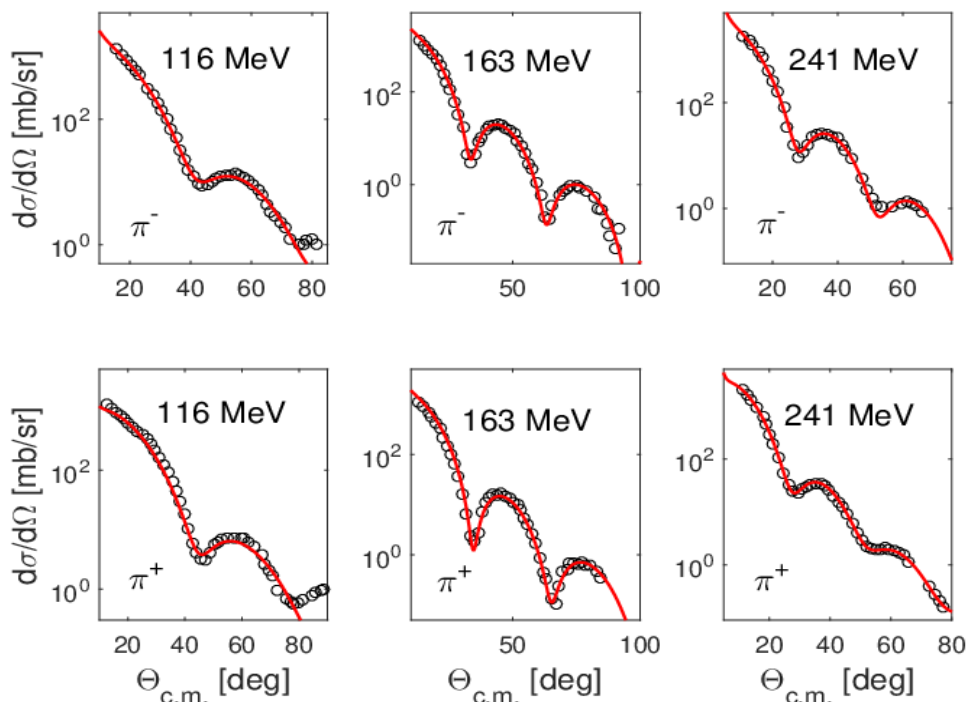
Слева: (а) сечения квазиупругого рассеяния  $^{12}\text{Be} + ^{12}\text{C}$  при  $E = 56$  МэВ/нуклон, рассчитанные с использованием плотности SF  $^{12}\text{Be}$  и SF (черная сплошная линия) и модифицированных (красная пунктирная линия) плотностей SF  $^{12}\text{C}$ . На панели (b) показаны расчеты с модифицированной плотностью SF  $^{12}\text{C}$  и с использованием плотностей SF (черная сплошная линия), GCM (красная пунктирная линия) и VMC (синяя пунктирная линия)  $^{12}\text{Be}$ . Справа: (а) То же, что и слева, но для  $^{14}\text{Be} + ^{12}\text{C}$ . На панели (b) показаны результаты с плотностью SF и GCM  $^{14}\text{Be}$  [33].

- Дальнейший численный анализ этих данных и описание программы приведены в [36].

- Численный анализ [37] дифференциальных сечений  $\pi^\pm$  упругого рассеяния на ядрах  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{208}\text{Pb}$  в диапазоне энергий от 130 до 290 МэВ. С этой целью были рассчитаны как фолдинговый оптический потенциал (ОП), так и локальный модифицированный ОП Кисслингера, а затем были получены сечения  $\pi A$  путем решения уравнения Клейна–Гордона для учета волновых эффектов релятивизации и дисторсии. В складывающихся ОП параметры элементарной амплитуды  $\pi N$  подгонялись при описании данных рассеяния  $\pi A$ , тем самым

устанавливалось существенное влияние среды на параметры амплитуды  $\pi N$ , поскольку пион рассеивается не на свободном, а на связанном ядерном нуклоне. Для обеих моделей оптических потенциалов получено достаточно хорошее согласие с экспериментальными данными, а их формы оказываются совпадающими в области их поверхностей.

- **Численный анализ [38] дифференциальных сечений упругого рассеяния пион-ядерного потенциала.** Полученные в 2022 г. результаты для рассеяния  $\pi^\pm + {}^{40}\text{Ca}$  при энергиях 116, 163 и 241 МэВ (см. рис. ниже) подтверждают сделанные на основе предыдущих расчетов оценки влияния ядерной среды на пион-нуклонную амплитуду. Развитый подход обеспечивает адекватное описание экспериментальных данных по пион-ядерному рассеянию в области резонансных энергий пиона (3,3).



Сравнение [38] сечений упругого рассеяния  $\pi^\pm + {}^{40}\text{Ca}$  при энергиях 116, 163 и 241 МэВ, рассчитанных по микроскопической модели оптического потенциала (красные кривые), с экспериментальными данными (кружки) из [Q. Ingram, et al., Phys. Lett. B **76** (1978) 173].

- **Численный анализ [39] дифференциальных сечений упругого рассеяния экзотического ядра  ${}^{17}\text{F}$  на ядрах  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{14}\text{N}$ ,  ${}^{58}\text{Ni}$  и  ${}^{208}\text{Pb}$  при 170 МэВ и на  ${}^{208}\text{Pb}$  при различных энергиях** дает хорошее согласие теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными. Установлен периферический характер рассеяния  ${}^{17}\text{F}$ .

- ▶ **Свойства дибарионов в ядерной среде [40].** Для легких ядер с  $A = 6$  ( ${}^6\text{Li}$  и  ${}^6\text{He}$ ) в кластерной модели  $\alpha + \text{NN}$ , учитывающей дибарионные резонансы в нуклон-нуклонном взаимодействии, получены основные параметры и волновые функции, определяющие структуру и свойства этих ядер.

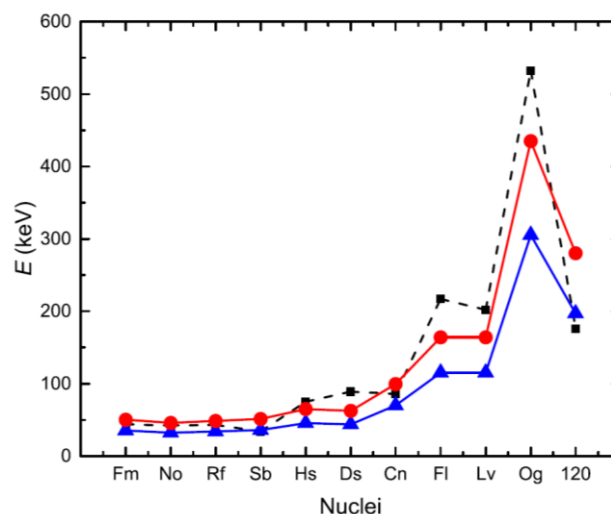
- ▶ **Вычисление наблюдаемых квазичастично-фононных моделей деформированных ядер (QPMN)** является ярким примером длительного успешного сотрудничества ЛИТ – ЛТФ. QPMN, сочлененная модель ядерной физики, совершенствовавшаяся в ЛТФ в течение нескольких десятилетий, нуждается в сложных вычислениях различных наблюдаемых, которые, как показывает всемирный прогресс в изучении деформированных ядер, представляют первостепенный интерес. Н.Ю. Ширикова (ЛИТ) была основным разработчиком специализированных модулей кода, которые постепенно добавлялись в структурированный пакет в ЛТФ. За 2020–2023 годы с ее участием опубликовано пять научных работ.

- Тонкая структура изовекторного гигантского дипольного резонанса (ИВГДР, IsoVector Giant Dipole Resonance – IVGDR) в  $^{142-150}\text{Nd}$  и  $^{152}\text{Sm}$  [41] обеспечивает систематическое исследование цепочки стабильных изотопов Nd с четной массой, представляющих собой переход от сферических к квадрупольно деформированным ядрам. Целью исследования было выделение эквивалентных сечений поглощения виртуальных фотонов и анализ их тонкой структуры в области ИВГДР. Используемые методы вейвлет-анализа позволили квантовать особенности тонкой структуры в виде характерных масштабов. Сравнение экспериментальных результатов и предсказаний модели показывает, что затухание Ландау, по-видимому, является основным источником тонкой структуры как в сферических, так и в деформированных ядрах.

- Значительный выход сверхтяжелых ядер в ЛЯР ОИЯИ сделал возможным их исследование методами гамма-спектроскопии. В [42] и [43] понимание строения четно-четных сверхтяжелых ядер предложено основывать на изучении энергии возбуждения их первых возбужденных состояний  $2^+$ ,  $E(2_1^+)$ .

В [42] предсказания энергий возбуждения первых состояний  $2^+$  цепочки четно-четных сверхтяжелых ядер указали на возможность использования феноменологического соотношения Годзинса в качестве разумного инструмента для оценки изменения  $E(2_1^+)$  по этой цепочке.

В [43] вычисляются подробные предсказания энергий возбуждения состояний  $2_1^+$  четно-четных сверхтяжелых ядер от  $^{256}\text{Fm}$  до  $^{296}\text{X}$ , отличающихся друг от друга числом  $\alpha$ -частиц. Хотя результаты действительно зависят от параметризации модели, получается резкое увеличение  $E(2_1^+)$  с  $A$ , чтобы достичь максимального значения 400–500 кэВ для  $^{284}\text{Fl}$  или  $^{292}\text{Og}$  (см. рисунок ниже).

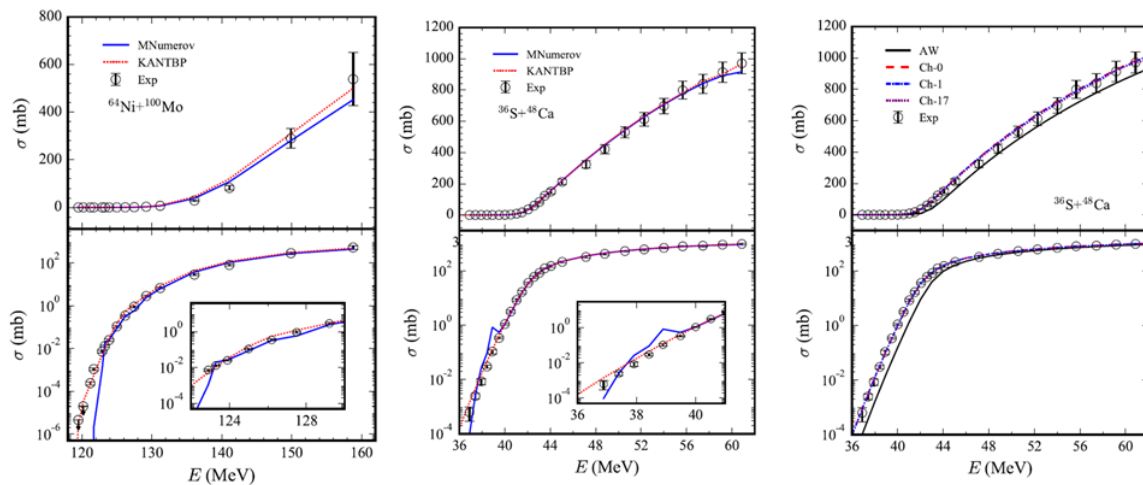


Предсказанные энергии состояний  $2_1^+$  для разных ядер. Расчеты выполнены для микроскопического варианта соотношения Гродзини (*штриховая линия с квадратами (черный цвет)*), феноменологического соотношения Гродзини [ $E(2_1^+)_{max}$ : *сплошная линия с кружками (красный цвет)*] и соответственно [ $E(2_1^+)_{min}$ : *сплошная линия с треугольниками (синяя)*] [43].

- Исследовано кориолисово перемешивание в хорошо деформированных четно-четных ядрах [44].
- Спин-изоспиновая структура моды ядерных ножниц изучается в [45].

► **Роль граничных условий в приборьерном синтезе тяжелых ионов [46].** Получено квантовомеханическое описание приборьерного слияния тяжелых ядер, происходящего при сильной связи их относительного движения с поверхностными колебаниями. С этой целью

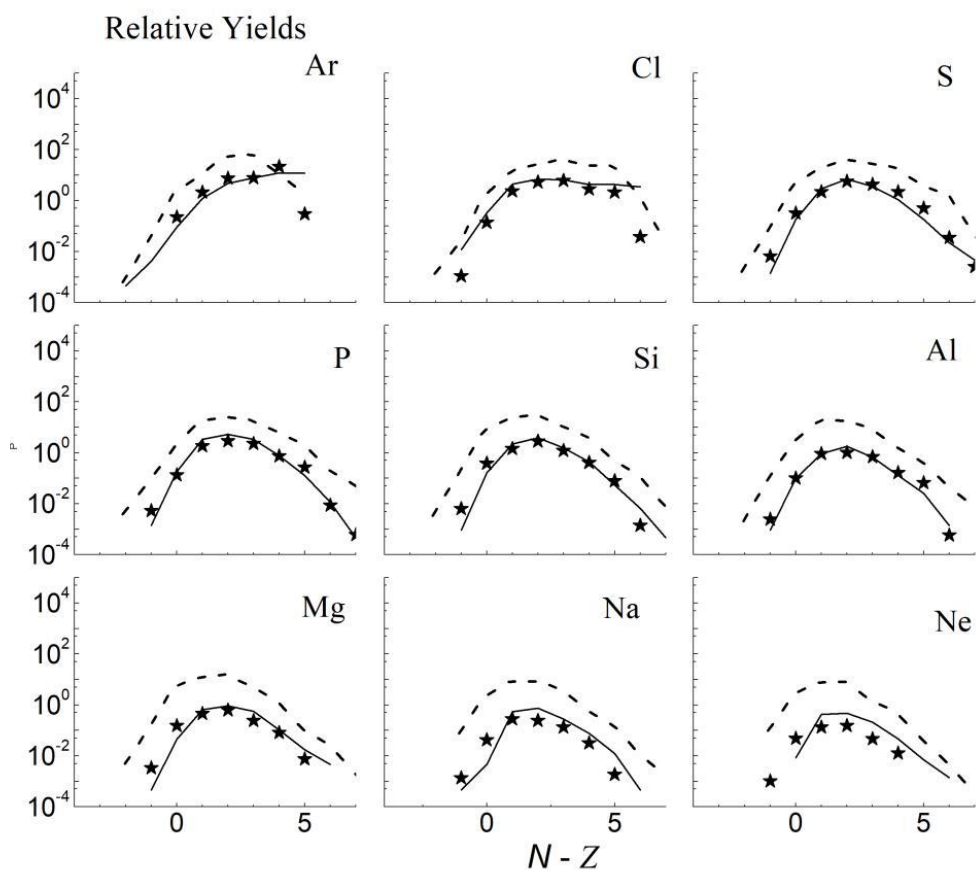
был предложен эффективный метод конечных элементов для численного решения связанных уравнений Шрёдингера с граничными условиями, соответствующими полному поглощению. Метод устраняет нестабильности в численных решениях, замеченные ранее при большом числе связанных каналов в некоторых реакциях. Чтобы проиллюстрировать правильность настоящего подхода, были повторно исследованы результаты сечения плавания реакций  $^{64}\text{Ni} + ^{100}\text{Mo}$  and  $^{36}\text{S} + ^{48}\text{Ca}$ . Полученные результаты показывают замечательное согласие с имеющимися экспериментальными данными. Установлено, что экспериментальные данные можно хорошо воспроизвести с потенциалом Вудса–Саксона, не задавая отталкивающих ядер. По-видимому, сечения слияния при глубоких подбарьерных энергиях чувствительны к профилю потенциального кармана.



Сравнение экспериментальных сечений плавания (светлые кружки) с результатами модельных расчетов. Левая и центральная панели: модельные данные CCFULL (сплошная линия, также обозначенная как MNumerov) и авторского KANTBP (пунктирная линия). Правая панель: расчеты со стандартным потенциалом AW и без связанных каналов показаны сплошными линиями.

Подгоночные расчеты, выполненные с 0, 1, 17 связанными каналами, представлены штрихованными линиями (Ch-0), штрихпунктирными линиями (Ch-1) и пунктирными линиями (Ch-17), соответственно [46].

► **Реакции фрагментации снарядов с тяжелыми ионами при энергиях Ферми, реализованные на установке COMBAS в ЛЯР,** дают огромное количество изотопов, далеких от долины стабильности. Понимание механизмов образования нейтронно- или протонно-избыточных изотопов является сложной задачей, решение которой постепенно формулировалось таким образом, чтобы включать: правильное определение состояний входных ядер, вступающих в столкновение; характеристику динамической эволюции функции плотности сталкивающихся ядер до точки замораживания; расчет энергий возбуждения снарядоподобных осколков; понимание процессов девозбуждения фрагментов, связанных с испусканием частиц и излучением. Результаты, полученные в рамках этого статистического подхода к численному моделированию различных шагов решения, представлены в [47–50]. Пример полученных результатов, характеризующих выходы изотопов от кислорода до лития в реакции  $^{18}\text{O}$  (35 МэВ/нуклон) на  $^{181}\text{Ta}$ , приведен на рисунке ниже.

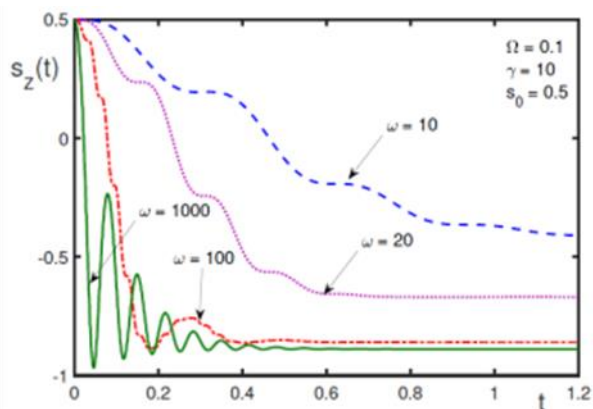


Относительные выходы изотопов [49] в столкновениях  $^{40}\text{Ar}$  (36.5 АМэВ) +  $^9\text{Be}$  (звезды) в сравнении с расчетами BNV-SMM (сплошные кривые) и предыдущими экспериментальными данными [189] (штриховые кривые). Названия изотопов даны в правых верхних углах картинок.

### 1.2.3. Численное моделирование систем конденсированного состояния

#### ► Решение динамических явлений в магнитных материалах [51,52].

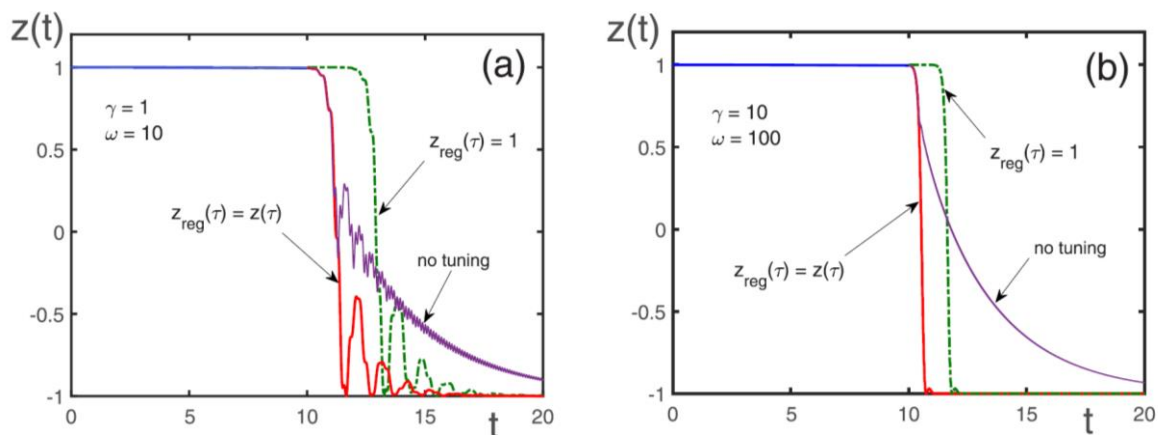
• **Сверхбыстрое переключение поляризации в сегнетоэлектриках [51].** Предложен и численно исследован метод сверхбыстрого переключения поляризации в сегнетоэлектриках с использованием эффекта самоускорения динамики поляризации через поле обратной связи. Зависимость переключения поляризации от изменения частоты  $\omega$  показана ниже.



Зависимость переключения поляризации от переменной частоты  $\omega$  для  $\Omega = 0,1$ ,  $\gamma = 10$ , для исходной поляризации  $s_0 = 0,5$ . Здесь:  $\omega = 10$  (штриховая линия);  $\omega = 20$  (пунктирная линия);  $\omega = 100$  (штрихпунктирная линия); и  $\omega = 1000$  (сплошная линия).

• Исследовано **быстрое регулирование направления намагниченности в магнитных наноматериалах**, таких как магнитные наномолекулы и нанокластеры. Метод может найти применение при создании запоминающих устройств и других устройств спинтроники [52].





Зависимость спиновой поляризации  $z(t)$  нанокластера или наномолекулы от времени при настройке динамического резонанса для различных параметров системы.

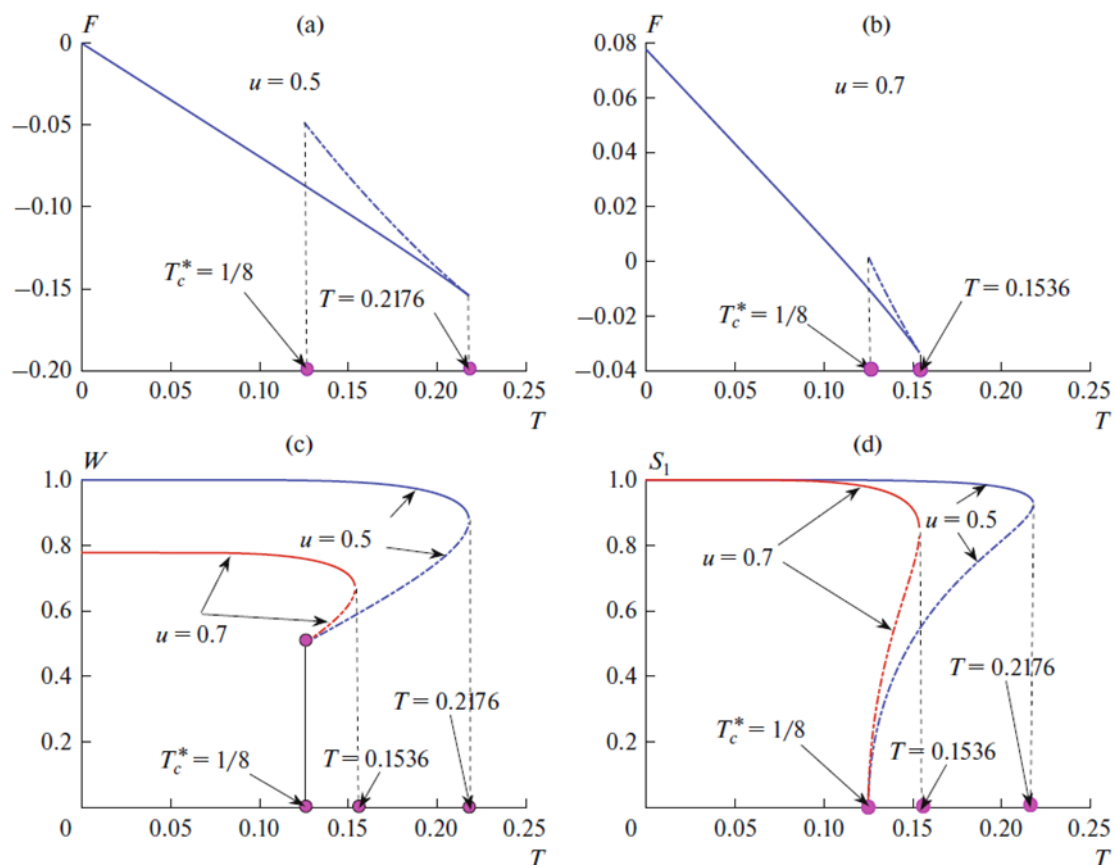
► **От асимптотических рядов к автомодельным аппроксимациям [53–56].**

Предложенный и развиваемый авторами метод автомодельных аппроксимаций строит приближенные решения сложных физических задач, начиная с асимптотических рядов и проходя через оптимизированную теорию возмущений. Метод характеризуется низкой вычислительной сложностью и сочетает в себе простоту с хорошей точностью. Многомасштабная автомодельная экстраполяция нелинейных задач [53] позволяет находить поведение решений при больших переменных, зная лишь несколько членов разложений по малой переменной. Сообщалось также о решении нескольких различных проблем [54–56].

► **Моделирование статистических систем, состоящих из нескольких этапов [57,58].**

• Разработана **микроскопическая статистическая модель сверхтекучего квантового твердого тела [57]**, в которой внутри кристаллической решетки могут существовать области беспорядка, такие как сети дислокаций или границы зерен. Предполагается, что ядра этих областей беспорядка обладают жидкоподобными свойствами. Если твердое тело состоит из атомов Бозе, то жидкообразные скопления внутри областей беспорядка могут проявлять конденсацию Бозе–Эйнштейна и, следовательно, сверхтекучесть. Эта микроскопическая статистическая модель дает возможность ответить, какие реальные квантовые кристаллы могут проявлять свойство сверхтекучести, а какие нет.

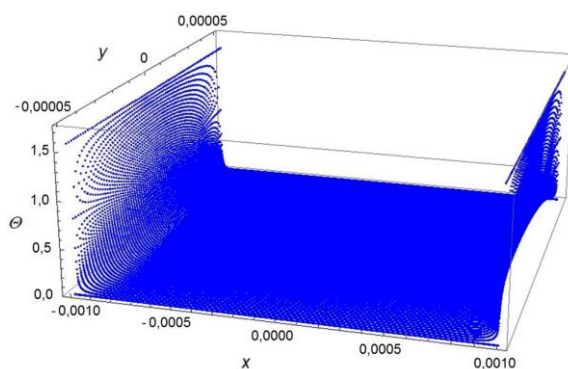
• **В обзоре [58]** рассматриваются статистические системы, состоящие из нескольких фаз, перемешанных в пространстве в мезоскопическом масштабе, и системы, представляющие собой смесь нескольких компонентов микроскопических объектов. Гетерогенные материалы, состоящие из мезоскопических смесей, широко распространены в природе. Общая теория таких мезоскопических смесей представлена и проиллюстрирована несколькими моделями конденсированного состояния. Смесь нескольких компонентов микроскопических объектов иллюстрируется кластеризацией кварк-адронной материи.



Две ветви решений термодинамического потенциала  $F$  в зависимости от безразмерной температуры  $T$  для параметров:  $u = 0,5$  (a) и  $u = 0,7$  (b). Вероятность термодинамической фазы  $W$  (c) и параметр порядка  $S_1$  в зависимости от температуры (d). Устойчивая ветвь показана сплошной линией, а неустойчивая – штрихпунктирной линией [58].

► Численное исследование коэффициента диффузии водяного пара в пористых средах [59,60].

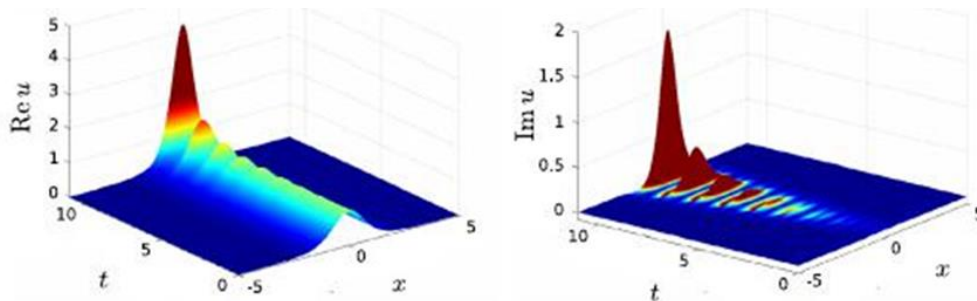
► Моделирование нематических жидкокристаллических оптических волноводных структур [61–63]. Описаны численные и экспериментальные исследования двух нематических жидких кристаллов (Nematic Liquid Crystal – NLC) оптических волноводных структур (жидкой тонкой волноводной линзы и тонкопленочной обобщенной волноводной линзы Люнебурга). Результаты двумерной динамической модели показаны на рисунке ниже. Получено лучшее согласие с экспериментом по сравнению с ранее использовавшейся статической моделью.



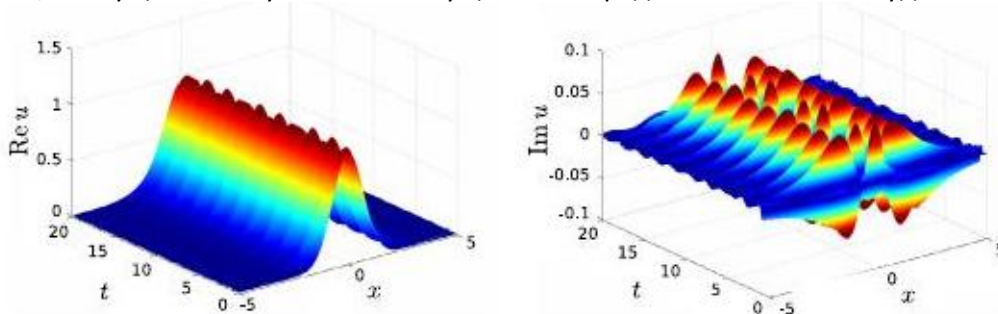
Динамика 2D-директора в ячейке 5CB NLC [62].

**Численное моделирование гладко-нерегулярных жидкокристаллических волноводных структур** (4-суано-40-пентилбипhenyl или 5CB) под действием внешнего поля позволило изучить возникающие неоднородные нестационарные области, характеризующиеся отсутствием ориентации части молекул жидкого кристалла под действием поля.

► **Решение нелинейных задач математической физики: устойчивые солитоны в почти PT-симметричном ферромагнетике со спин-переносным моментом [64].** Незатухающее уравнение Ландау–Лифшица для осциллятора спинового момента, одноосного ферромагнетика во внешнем магнитном поле с протекающим через него поляризованным спиновым током, является PT-симметричным при отсутствии затухания Гилберта. В окрестности точки бифуркации однородного статического состояния намагниченности PT-симметричное уравнение Ландау–Лифшица с малым диссипативным возмущением сводится к нелинейному уравнению Шрёдингера с квадратичной нелинейностью. Анализ динамики Шрёдингера показывает, что устойчивые солитоны могут существовать в одном и двух измерениях. Близкая к PT-симметрия уравнения Ландау–Лифшица имеет решающее значение для устойчивости солитона. Далее следуют иллюстрации:

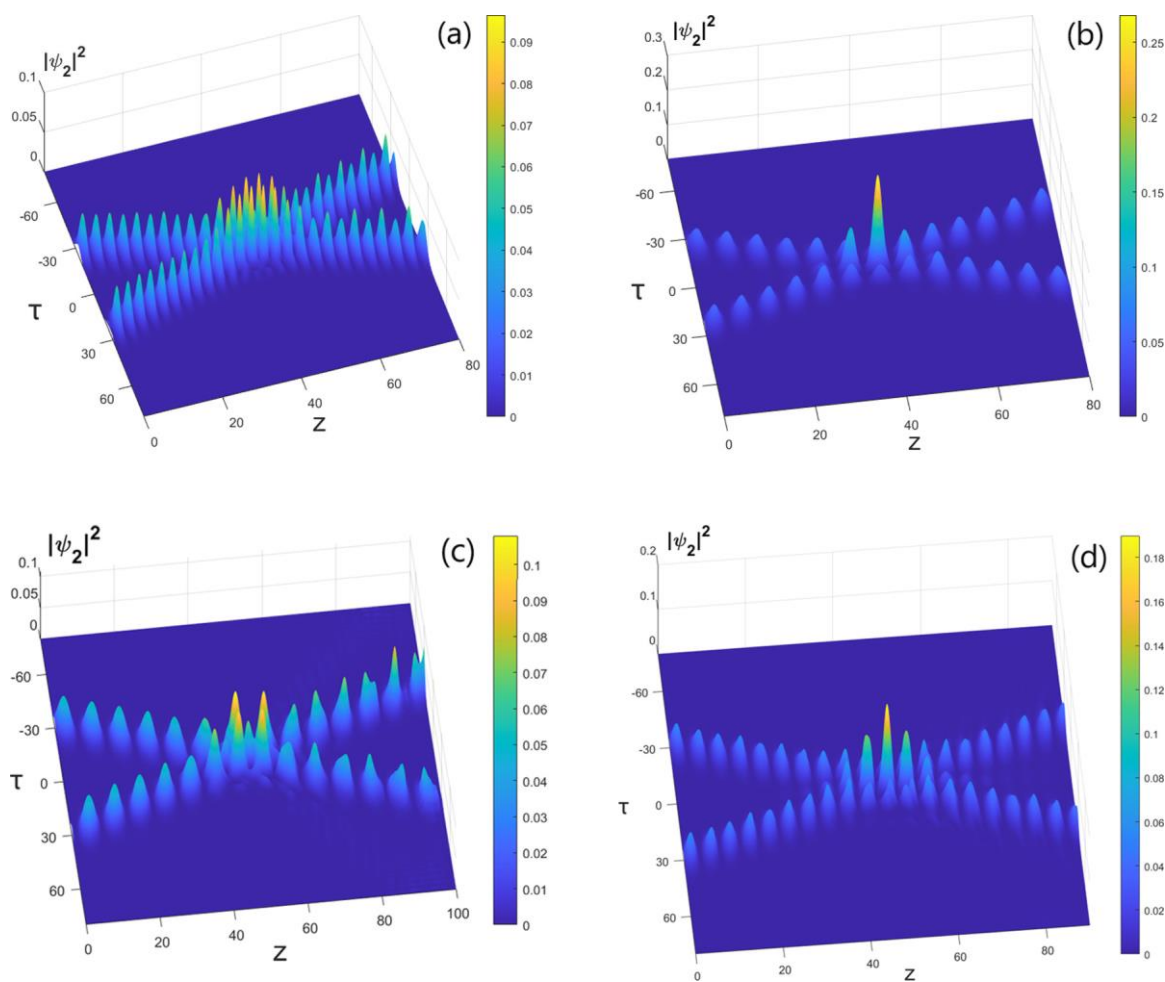


Неустойчивость основного солитона при наличии затухания. Начальное условие представляло собой солитон, возмущенный случайным возмущением в пределах 5 % от амплитуды солитона.



Эволюция начального условия в виде гауссиана. *Левая панель: Re u; правая панель: Im u.* Возникающее решение представляет собой бризер с малой мнимой частью и близкой к солитону реальной частью.

► **Вращающиеся солитоны в ожерелье волноводов [65].** Рассмотрены световые импульсы в кольцевой решетке из  $2N$  связанных нелинейно-оптических волноводов. Волноводы либо эрмитовы, либо имеют переменное усиление и затухание PT-симметричным образом. Простые паттерны в массиве включают кольцо из  $2N$  импульсов, движущихся в ряд, и бризер – цепочку импульсов, в которой по очереди мигают все четные и все нечетные волноводы. Кроме того, структура отображает солитоны, вращающиеся вокруг ожерелья, переключаясь с одного волновода на другой. Некоторые из вращающихся солитонов устойчивы, в то время как другие слабо неустойчивы и превращаются во вращающиеся струны мультиспышек. Настраивая коэффициент усиления/потери, можно обратить вращение солитонов в неэрмитовой решетке без изменения направления их поступательного движения.



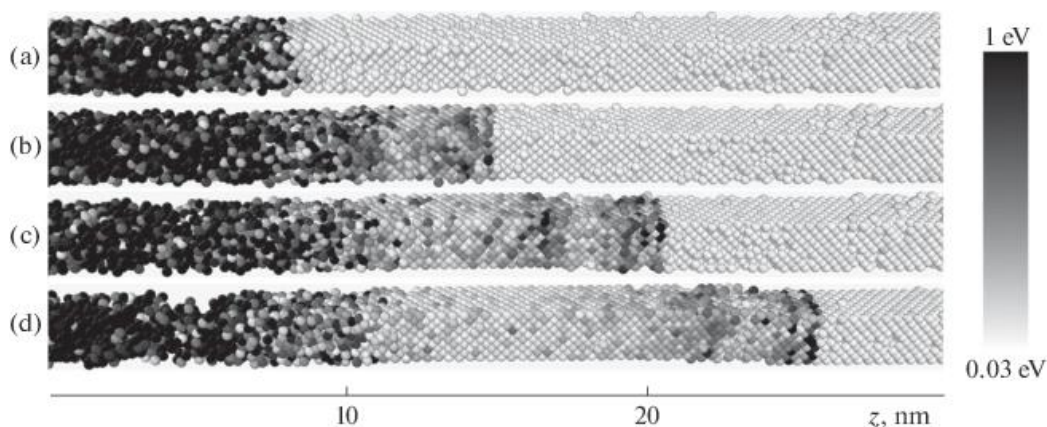
Рассеяние вращающихся солитонов в ожерелье из  $2N = 6$  волноводов при различных значениях параметров модели.

#### 1.2.4. Численное моделирование кинетических высокоэнергетических процессов в материалах

Получены результаты по двум видам взаимодополняющихся исследований: (а) молекулярно-динамическое моделирование поведения твердых образцов заданной геометрии и природы при бомбардировке высокоэнергетическими частицами или нанокластерами; б) моделирование в рамках модели теплового пика процессов абляции в фольгах под действием лазерного излучения.

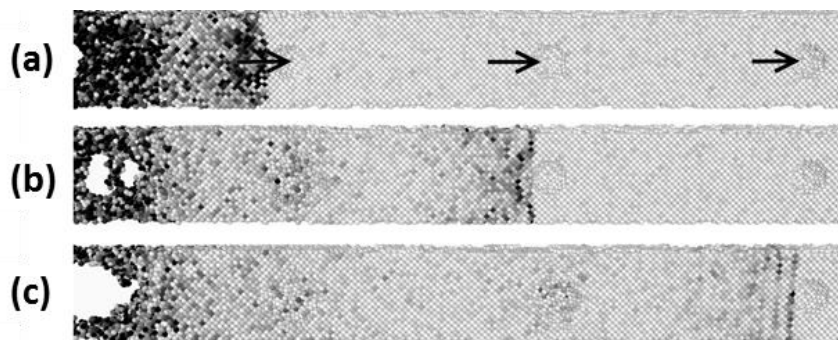
► Молекулярно-динамическое моделирование облучения металлов нанокластерами [66,67]

- Молекулярно-динамическое моделирование эффектов, возникающих в металлах при облучении нанокластерами [66]. Получены результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования облучения металлических мишеней импульсными ионными пучками в зависимости от энергии ионов и размера мишени. Полученные результаты показывают, что за счет увеличения плотности энергии и мощности облучения (количества частиц) можно изменять структуры дефектов на различной глубине мишени.



Динамика тепловых процессов и ударная волна при облучении четырьмя ионами меди с энергией 1 кэВ в моменты времени: 1 (a); 2 (b); 3 (c); 4 пс (d). Размер мишени  $2 \times 2 \times 40$  нм [66].

- Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия нанокластеров меди с металлическими мишенями.** В коллаборации с коллегами из Болгарии и Монголии, методом молекулярной динамики исследованы образцы меди, железа и никеля со структурой реальных кристаллов с заданными дефектами порового типа, облученные нанокластерами меди с энергиями в диапазоне 1 эВ/атом–100 эВ/атом [67]. Моделирование и тестирование проводились с использованием модифицированного пакета LAMMPS, установленного на гетерогенном вычислительном кластере HybriLIT. Численное моделирование позволило исследовать влияние ударных волн на дефектные структуры, такие как поры в мишени. Получены пороговые энергии облучения нанокластерами меди, изменяющие структуру дефекта в мишенях. Полученные результаты показывают, что дефекты типа пор в железной мишени более устойчивы к действию ударной волны по сравнению с образцами из меди и никеля. Разрешены структурные изменения глубины мишени в зависимости от энергии нанокластера и размера мишени. Установлено формирование плотноупакованной гексагональной решетки вблизи дефекта порового типа в медной мишени в зависимости от энергии облучения нанокластеров.



Динамика ударной волны в медной мишени в моменты времени 1,5 пс (a), 4,4 пс (b) и 7,4 пс (c) при облучении нанокластером 100 эВ/атом. Стрелками указано расположение пор и направление движения ударной волны [67].

- Численное моделирование тепловых процессов, происходящих в материалах под действием ультракоротких лазерных импульсов [68,69].** Динамика теплового механизма лазерной абляции [68] описывается в рамках одномерного нестационарного уравнения теплопроводности, с учетом лазерного воздействия, через функции источника в уравнении теплопроводности, определяющие координату и время. Получена зависимость максимальной температуры на поверхности образца и толщины абляционного слоя от дозы облучения падающим лазерным импульсом.

Математическая формулировка тепловых процессов, происходящих в материалах под действием фемтосекундных лазерных импульсов [69], осуществляется в рамках гиперболических уравнений, описывающих теплопроводность. Установлено, что на температуру образца существенно влияет не только плотность мощности источника, но и скорость ее изменения.

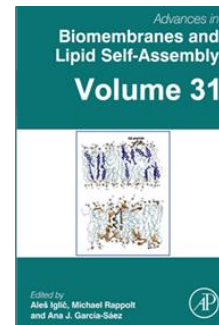
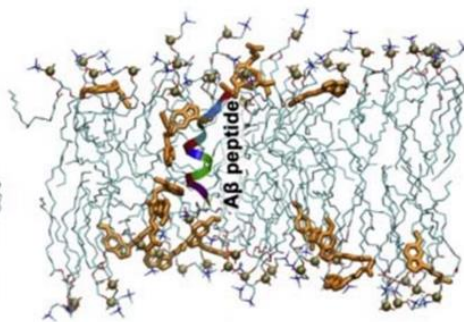
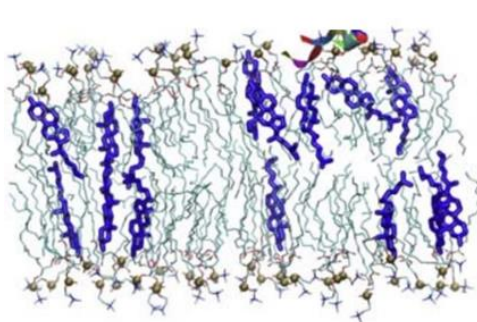
Численное моделирование процессов абляции в материалах под действием фемтосекундного лазерного излучения получило дальнейшее развитие в рамках модели теплового пика (Thermal Spike Model – TSM), описываемой гиперболическими уравнениями теплопроводности (H-TSM). Подробные численные эксперименты, проведенные для полубесконечных материалов [70], позволили явно разделить вклад членов диффузии и конвекции во времена релаксации как электронного газа, так и кристаллической решетки.

Во втором исследовании [71] модель H-TSM была сформулирована для образцов конечной толщины. В этом случае толщина образца явно входит как в диффузионный, так и в конвективный члены уравнений теплопроводности, а также в исходный член уравнений модели H-TSM и граничные условия задачи. Эффективная скорость конвективного члена определяется через скорость перемещения верхней и нижней границ образца. Детальные численные эксперименты показали наличие характерных зависимостей процессов испарения от толщины образца.

### 1.2.5. Численное моделирование в радиационной биологии

► **Выяснение роли бета-амилоидного пептида (A $\beta$ ) как ключевого фактора болезни Альцгеймера [72–75].**

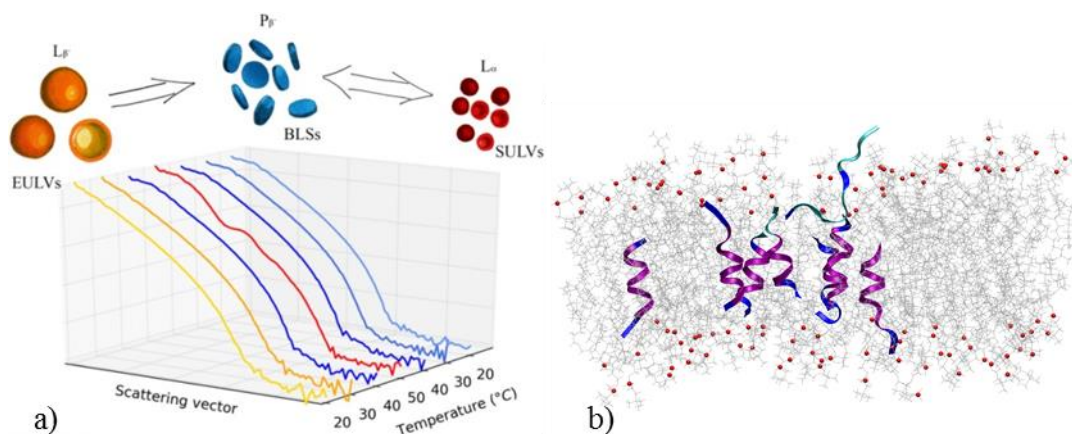
• **Взаимодействия в модельных мембранах, имитирующих доклинические конформационные заболевания [72].**



Снимки МД моделирования, изображающие липидный бислой, загруженный холестерином (слева) и мелатонином (в центре). Взаимодействия пептида A $\beta$  с более жесткой мембраной в первом случае вынуждают его располагаться на границе раздела мембрана–вода. В последнем случае пептид A $\beta$  встраивается внутрь более жидкой мембраны. Справа показана обложка тома.

Хотя полное понимание физико-химических процессов, происходящих в биомембранах, не полностью установлено, понимание эласто-механических свойств липидного бислоя обеспечивает основу для лучшего понимания структурно-функциональных отношений, которые, безусловно, имеют место в сложных биомембранных системах. В исследовании рассматривается механизм болезни Альцгеймера. Обложка тома иллюстрирована результатами [72].

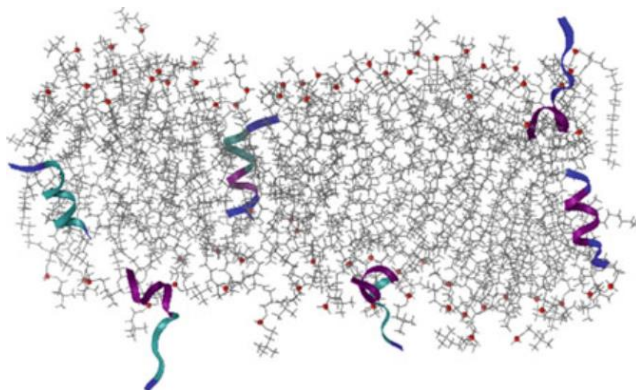
• **Роль бета-амилоидного пептида (25–35) в реорганизации липидных мембран, вызванной изменениями температуры [73].**



Эволюция организации мембран DPPC/A $\beta_{25-35}$  при изменении температуры, предложенная SANS. Переход от исходных EULV к BLS является необратимым, а переход BLS к SULV – обратим. б) Снимок МД моделирования системы DPPC/A $\beta_{25-35}$  после 1 мкс симуляции.

Понимание повреждающего действия бета-амилоидного пептида (A $\beta$ ) в последнее время сместилось от крупных фибрилл, наблюдаемых в межклеточной среде, к небольшим олигомерам, взаимодействующим с клеточной мембраной. Это действие было выведено из малоуглового рассеяния нейтронов (SANS), которое указывало на возникновение спонтанного преобразования экструдированных однослойных везикул (EULV) в дискоидальные бицелло-подобные структуры (BLS) и маленькие однослойные везикулы (SULV). Это резкое изменение общей формы мембраны связано с параллельными изменениями ее толщины, поскольку A $\beta_{25-35}$  вызывает повреждение мембраны, и с последующей реорганизацией ее структуры.

• Представлен обзор [74] исследований сложной модели биологических мембран с использованием различных экспериментальных и теоретических методов. Изучаются эффекты, модулируемые присутствием пептидов A $\beta$ , и, что более важно, способы взаимодействия между мембранами и пептидами. Моделирование мономера A $\beta_{25-35}$  в неявном окружении водной мембраны и явной мембране DMPC с водными моделями с помощью REMD показало, что пептид может присутствовать в мембране в двух состояниях – в поверхностно-связанном состоянии и в менее стабильном встроенном состоянии, между которыми A $\beta$  часто может быть преобразован (рис. 10.10 из [74] иллюстрирует эти особенности, см. ниже):



Снимки конформаций A $\beta_{25-35}$  (спираль показана фиолетовым цветом, виток – голубым, а змеевик – синим цветом) и положения в фосфолипидной мембране (атомы фосфора показаны красными точками, остальные липиды показаны серым цветом; вода для упрощения презентации не указана).

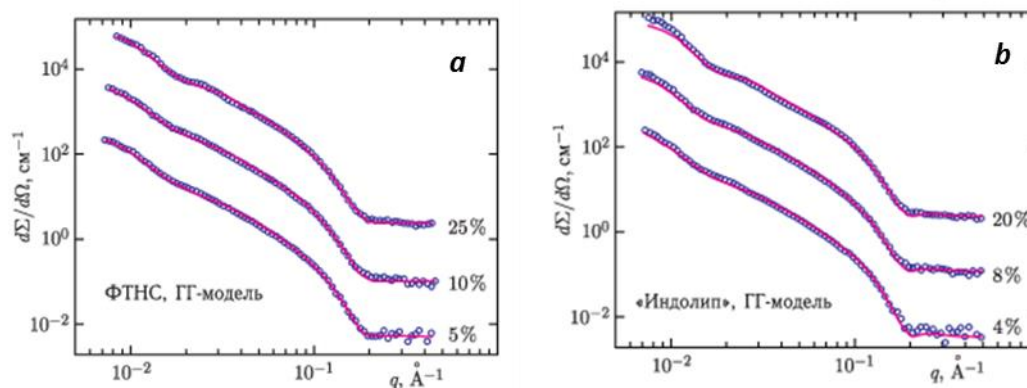
• Изменения толщины мембраны и общей структуры мембраны, с включением A $\beta_{25-35}$  и без него, были исследованы в широком диапазоне температур. Результаты подтверждают ранее сообщавшуюся независимость от наличия заряда в системе морфологических

преобразований между бицеллоподобными структурами, присутствующими в гелевой фазе, и небольшими однослойными везикулами, присутствующими в жидкой фазе [75].

► **Численный анализ в рамках метода разделенного формфактора структуры фосфолипидных мембран везикулярных систем по данным малоуглового нейтронного и рентгеновского рассеяния** является одной из актуальных тем современной нано- и биофизики в связи с многочисленными приложениями этих объектов в медицине, фармакологии и косметологии.

- Разработаны два пакета программ для эффективного анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов с разделенными форм-факторами. Параллельная реализация на основе MPI ускоряет вычисления в 6–16 раз; онлайн-интерфейс на базе Windows обеспечивает удобную работу с соответствующей локальной процедурой минимизации. Обсуждается перспектива расширения этого инструмента в рамках платформы HybriLIT МИВК ОИАИ [76].

- В рамках метода разделенного формфактора проведен анализ спектров малоуглового рассеяния нейтронов (SANS), измеренных на малоугловом спектрометре ЮМО на полидисперсных популяциях однослойных везикул фосфолипидной транспортной наносистемы (ФТНС) и нанопрепарат Indolip в тяжелой воде в трех концентрациях. Обсуждаются возможности получения информации о структуре нанопрепаратов на основе ФТНС по данным SANS. Основные структурные параметры этих везикулярных систем, полученные при компьютерном анализе спектров SANS, в целом согласуются с соответствующими результатами обработки данных малоуглового рентгеновского рассеяния (SAXS). В то же время, метод SANS оказывается менее чувствительным по сравнению с SAXS, в части детального учета особенностей строения бислоя оболочки везикул. Работа выполнена совместно с ЛНФ [77].



Расчетные и экспериментальные спектры SANS на образцах везикул ФТНС (а) и индолипа (б) в 4, 8, 20% растворах мальтозы. Расчет выполнен с использованием модели гидрофильно-гидрофобного бислоя.

- На платформе HybriLIT реализован **программный комплекс, предназначенный для анализа строения везикулярных систем** по модели разделенных формфакторов (SFF-Analysis). Программа обеспечивает упрощенный запрос ресурсов при запуске задачи, веб-мониторинг процесса расчета и визуализацию результатов [77].

► **Упрощенная модель SIR пандемии COVID-19** [78]. Предложена математическая модель пандемии COVID-19, сохраняющая оптимальный баланс между адекватным описанием пандемии моделью SIR и простотой практических оценок. Представлены примеры моделирования развития пандемии в зависимости от двух параметров: времени возможного распространения инфекции одним вирусоносителем и вероятности заражения



здорового члена населения при контакте с инфицированным в единицу времени, например, сутки. Результаты качественно согласуются с динамикой пандемии COVID-19. Предложенная модель сравнивается с моделью SIR.

► **Пополнения библиотеки программ JINRLIB в 2020 г.:**

• **SIR – модель SIR – простейшая модель эпидемического процесса** (20-е мая 2020 г.) [79]. Рассмотрена простейшая 3-х стадийная модель после моделей Мальтуса и Ферхюльста, обозначаемая в литературе аббревиатурой SIR (S – восприимчивый – susceptible, I – клиническими испытаниями инфекционного заболевания, R – выздоровевший – recovered), с зависящими от времени коэффициентами. Модель сопоставляется с текущими статистическими данными, которые находятся в открытом доступе. Неизвестные параметры модели находятся путем минимизации несоответствия между прогнозом и доступной статистикой.

• **Моделирование мультифрактальной динамики пандемии COVID-19** осуществляется в рамках математической модели, альтернативной другим моделям и лишенной их недостатков. Она основана только на фрактальных свойствах пандемий и позволяет описывать их поведение во времени без использования гипотез и предположений о структуре болезненного процесса. Модель применена для описания динамики пандемии COVID-19 с 1-го по 699-й день от начала пандемии [80].

### 1.2.6. Численное моделирование других систем

► **Асимптотическое решение задачи Штурма–Лиувилля с периодическими краевыми условиями для релятивистского конечно-разностного уравнения Шрёдингера** [81]. В статье рассматриваются задачи Штурма–Лиувилля с периодическими краевыми условиями на отрезке и на положительной полупрямой для усеченного релятивистского конечно-разностного уравнения Шрёдингера порядка  $2m$  (уравнение Логанова–Тавхелидзе–Кадышевского) с малым параметром. Предложен метод построения асимптотических собственных функций и собственных значений в виде асимптотических рядов для сингулярно возмущенных задач Штурма–Лиувилля с периодическими краевыми условиями. Их решения позволяют описать цепочки поведения гармонических осцилляторов с периодическими граничными условиями, когда они находятся очень далеко друг от друга. Решения актуальны для описания ограниченных состояний элементарных частиц в кварк-глюонной плазме.

► **Алгоритмы расчета сечений развала димезоатома в кулоновских полях.**

В приближениях Борна и Глаубера рассчитаны импульсные и угловые распределения пар заряженных мезонов  $h^+h^-$  ( $h = \pi; K$ ) от развала элементарных атомов в кулоновском поле мишени [82]. Разработан новый алгоритм расчета нормированного дифференциального сечения Мотта рассеяния электронов на кулоновском потенциале, а также метод расчета поправки Мотта к формуле Бете для средних потерь энергии на ионизацию тяжелыми ионами. Полученные на этой основе результаты сравниваются с результатами расчетов другими методами в широких диапазонах значений зарядового числа ядра иона, энергий электронов и угла их рассеяния [83,84].

► **Кинетическая стабилизация нестабильных степеней окисления металлов при замораживании комплексообразования** [85,86].

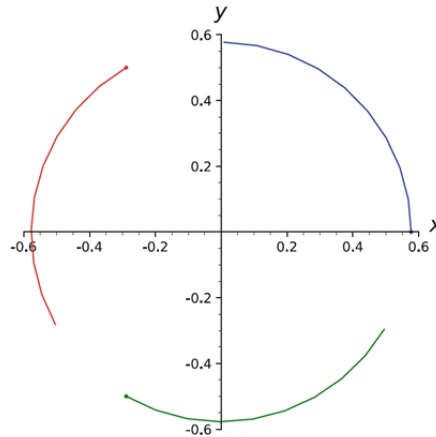
► **Моделирование процессов истощения сырьевых ресурсов** [87,88].

► **Решение задачи триангуляции лазерных датчиков** [89].

► **Свежие идеи для решения старых проблем** [90,91].

► **О периодических приближенных решениях задачи трех тел** [92]. Задача Лагранжа о нахождении всех приближенных решений задачи трех тел, при которых расстояния между

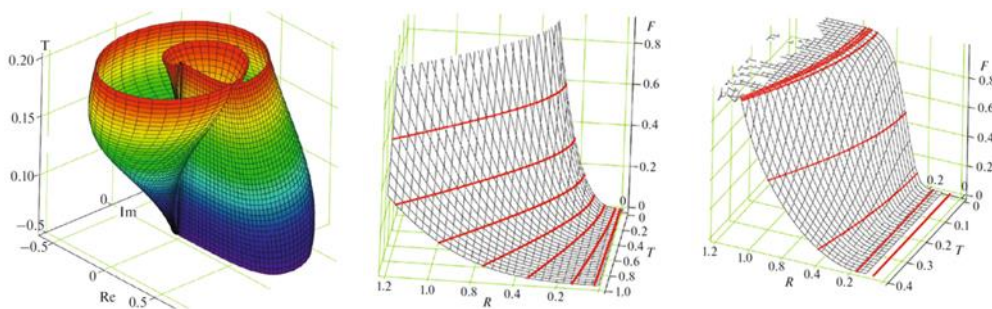
талами остаются постоянными, свелась к изучению свойств линейных осцилляторов. В частности, оказывается, что периодичность точного решения в случае Лагранжа, когда тела образуют правильный треугольник, наследуется приближенным решением.



Решение задачи трех тел в случае Лагранжа,  $\Delta t = 0,1$ .

► **Приближенное вычисление матричных функциональных интегралов, порожденных релятивистским гамильтонианом [93].** Предложен алгоритм, позволяющий существенно снизить требуемые ресурсы компьютера по сравнению с другими известными методами.

► **Рассмотрен метод нахождения точных решений первого уравнения из цепочки уравнений Власова,** формально аналогичный уравнению неразрывности [94]. Исследуемое уравнение написано для скалярной функции и векторного поля, которые зависят от постановки задачи. Математически одно и то же уравнение применимо для описания статистических, квантовых и классических систем. Точное решение, полученное для одной физической системы, может быть отображено на точное решение другой системы. Наличие точных решений модельных нелинейных систем важно при проектировании сложных физических установок, таких как детектор SPD для проекта NICA.



Пример множества полученных результатов приведен выше. Слева показана эволюция волновой функции до возникновения ударной волны. Центральная и правая панели иллюстрируют эволюцию во времени функции распределения вероятностей для постоянной начальной плотности распределения вероятностей (без ударной волны – в центре) и для гауссовского начального распределения с ударной волной (справа).

► **Космологические исследования в различных моделях Вселенной [95–101].** Роль спинорных полей, характеризующихся неминимальной связью в эволюции Вселенной, изучалась в различных моделях Вселенной.

### 1.3. Новые способы снижения чрезмерной сложности внутренних задач

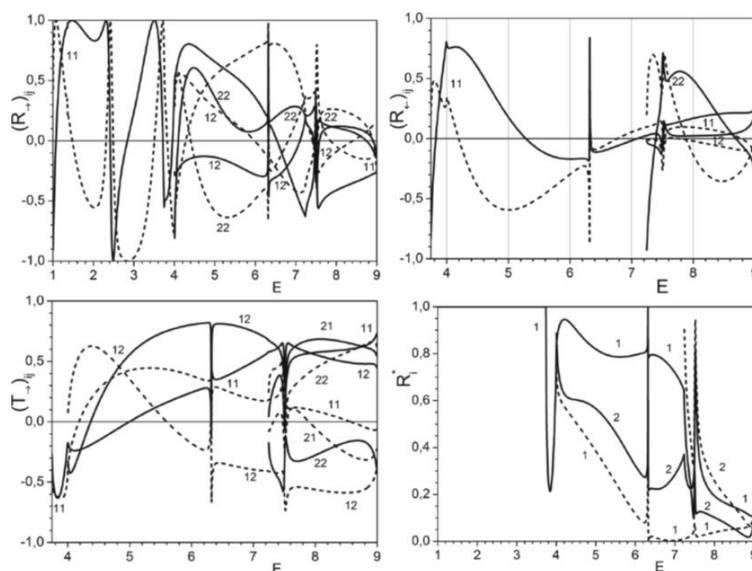
- Новые символьно-численные схемы с использованием метода конечных элементов (МКЭ) [102], разработаны на основе аналитических интерполяционных полиномов Эрмита от  $d$  переменных на стандартных  $d$ -мерных гиперкубе и симплексе. Они служат для решения краевых задач, возникающих из задач физики, таких как модель коллективного ядра квадрупольных колебаний.

Особым применением нового МКЭ является решение колебательно-вращательных состояний димера бериллия с реалистичными потенциалами [103].

Конкретным компонентом указанных схем является программа KANTBP 4M, реализованная в системе компьютерной алгебры MAPLE для решения, с заданной точностью, задачи многоканального рассеяния. Должно обновление этой программы [104].

МКЭ и обновленная программа KANTBP используются для расчетов связанных каналов для реакций синтеза тяжелых ионов [105]. Эффективность предложенного подхода подтверждается успешным описанием экспериментальных данных для сечения подбарьерного и надбарьерного синтеза некоторых реакционных систем.

- Символьно-численные алгоритмы решения задач с комплексными собственными значениями энергии [106–108]. Спектры вибрационно-ротационных связанных, метастабильных состояний и состояний рассеяния димера бериллия в основном  $X^1\Sigma_g^+$  состоянии, которые важны для лазерной спектроскопии, рассчитаны впервые с использованием разработанного авторского программного пакета KANTBP 5M, реализующего метод Ньютона и метод конечных элементов высокого порядка точности. 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.

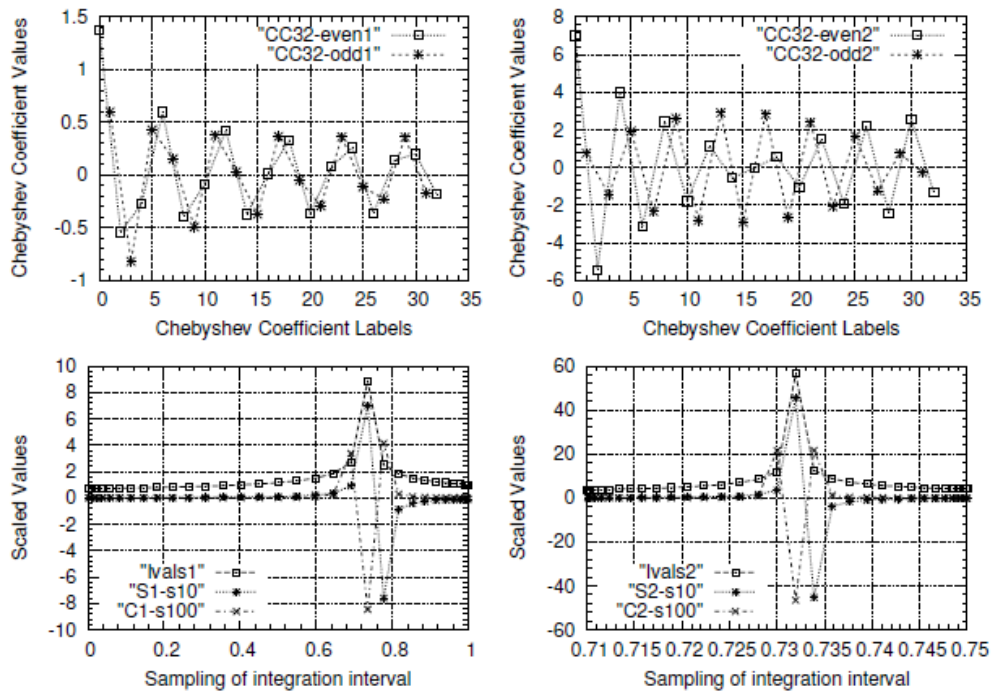


Вещественные (сплошные кривые) и мнимые (пунктирные кривые) части элементов  $(R_{-})_{ij}$ ,  $(R_{-})_{ij}$ ,  $(T_{-})_{ij} = (T_{-})_{ji}$  отражения  $\mathbf{R}_{\rightarrow}$ ,  $\mathbf{R}_{\leftarrow}$  и пропускания  $\mathbf{T}_{\rightarrow}$ , амплитуд  $\mathbf{T}_{\leftarrow}$ , и коэффициентов отражения  $R_{-}^{*} = (\mathbf{R}_{\leftarrow}^{\dagger} \cdot \mathbf{R}_{\rightarrow}^{*})_{ii}$  для  $* \Rightarrow$  (сплошные кривые) и  $* \Leftarrow$  (пунктирные кривые) как функции энергии рассеяния  $E$ .

- Адаптированная симметрия  $D_{3h}$  коррелировала три центральные волновые функции основного и первых пяти возбужденных состояний  $\text{H}_3^+$  [109]. Исходная трехцентровая

волновая функция построена с помощью неприводимых представлений точечной группы  $D_{3h}$ , которая характеризует симметрию плоской равносторонней треугольной молекулы  $H_3^+$ . Результаты этой работы и реализация вычислительных методов открывают путь дальнейшим исследованиям сложных трехцентровых систем.

- **Адаптированные к задаче многомасштабные квадратурные алгоритмы [110].** Использование правила  $m$ -панелей (CC-32, квадратуры Кленшоу-Кертиса с алгебраической степенью точности  $m = 32$ ) в макроскопических диапазонах интегрирования дополняется трехточечными правилами Симпсона, натянутыми на триплеты последовательных узлов CC-32. Это позволяет идентифицировать и точно характеризовать плохую обусловленность подынтегральной функции с помощью диагностики, нечувствительной к масштабу (см. рисунок ниже).



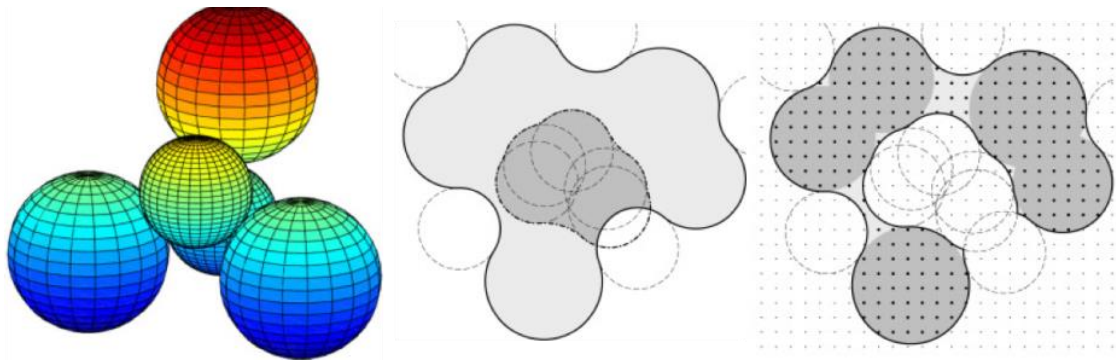
(Вверху) Пример 1: CC-32 правило дает коэффициенты разложения Чебышева, демонстрирующие нерегулярное поведение: Слева – на  $[0; 1]$ ; Справа – на  $[0;71; 0;75]$ . (Внизу) Три базовых элемента правила Симпсона (Ivalsk): значения подынтегрального выражения  $k$ ,  $S_k$ -s10: Наклоны  $k$ , масштабный коэффициент  $10^{-1}$ ;  $C_k$ -s100: кривизны  $k$ , масштабный коэффициент  $10^{-2}$ ) дают байесовский вывод о сингулярности подынтегрального выражения ( $k = 1$ ; слева), подтвержденный при итерации на меньшем интервале ( $k = 2$ ; справа).

- **Байесовская автоматическая адаптивная квадратура** одномерных интегралов Римана с двумя правилами (B2AAQ) критически управляется априорной информацией, предоставленной пользователем. Определены условия, обеспечивающие прямой элементарный ввод параметров задачи, которые приводят либо к одному дереву, либо к лесу деревьев решений на подинтервалах. Это обеспечивает повышение устойчивости, надежности и эффективности B2AAQ, а также значительное расширение его области применения по сравнению с пакетом QUADPACK, который является ядром разделов вычислительного интегрирования основных компьютерных библиотек по всему миру [111].

- **МБЭ-ПК** (Метод базисных элементов – «Корректор–предиктор», Basic Element Method – “Predictor Corrector”, BEM-PC) пятого полиномиального порядка разработан для численного решения задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений [112]. Основными строительными блоками метода являются надлежащим образом определенные «базовые элементы», в которых используются, которые, как было ранее доказано, способны

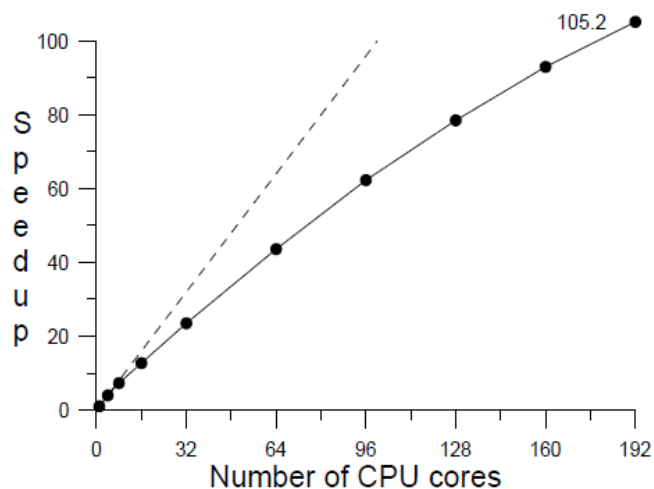
подавлять ошибки и обеспечивать реализацию стабильных алгоритмов обработки экспериментальных данных. Продвижение решения на предварительную длину шага  $h$  происходит через определение предиктора, натянутого на два полинома МБЭ пятой степени. Проверка предварительного значения  $h$  управляется ключевым параметром  $K$  ( $0 < K < 1$ ). Эмпирически было показано, что новый метод МБЭ-ПК стабилен вплоть до чрезвычайно малых размеров шага  $h$ . Эта особенность делает его пригодным для решения жестких задач.

- **Решение сложных макромолекулярных задач: PBCAVE [113]** Аналитически определенное положение всех точек дискретизации сетки в расчетной области, заданной внутри белка, для использования «правильного» значения диэлектрической проницаемости в этих точках. Заданные значения диэлектрической проницаемости (рисунок ниже) используются в решателе линейного уравнения Пуассона–Больцмана для системы белок–вода методом конечных разностей.



«Стеновой» треугольник из трех атомов (больших сфер) молекулы и двух соприкасающихся зондовых сфер (точки между ними недоступны для зондовых сфер, поэтому находятся в «вакууме») (слева). Пересечения внутренней и внешней молекулярных поверхностей (посередине). Точки сетки, недоступные для воды, в зависимости от радиуса тестируемой сферы (справа)

- **Распараллеливание метода рядов Тейлора с множественной точностью [114].** Гибридная стратегия MPI + OpenMP была реализована и протестирована на парадигматической модели системы Лоренца. На конфигурации со 192 ядрами CPU, вычисление 2800-го порядка с 3510 десятичными знаками длилось ~148 часов, с коэффициентом ускорения около 105 (см. рис. ниже).



## 2. Программные комплексы и математические методы для обработки и анализа экспериментальных данных

Проектирование, разработка, внедрение и сопровождение модулей объектно-ориентированных специализированных научных библиотек представляют наш вклад в решение исследований, проводимых ОИЯИ на экспериментальных установках.

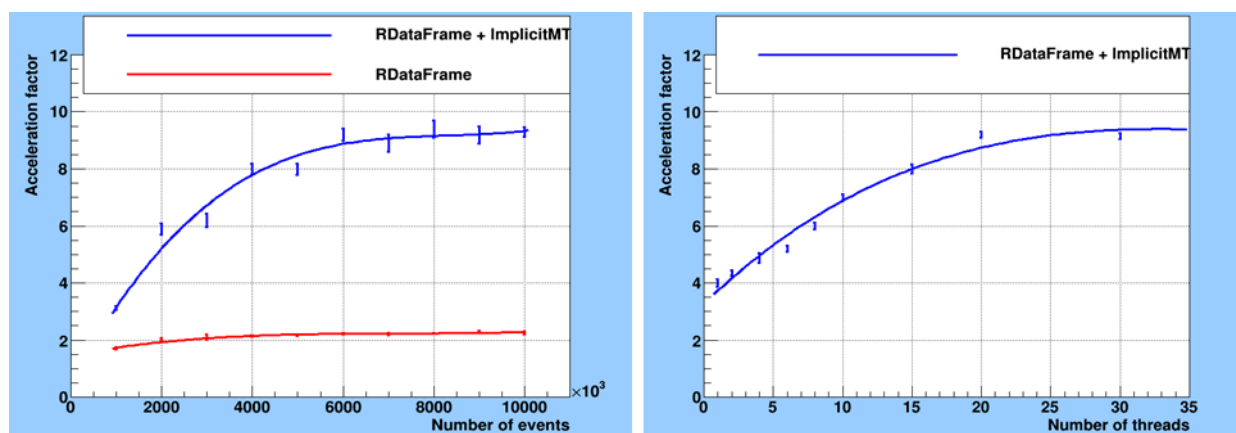
### 2.1. Инструменты Parallel ROOT (PROOT) для анализа экспериментальных данных

Параллельный пакет ROOT (PROOT) – это модернизированный пакет CERN ROOT объектно-ориентированных (ОО) программ и библиотек, адаптированный к многоядерным и многопроцессорным аппаратным средствам CPU и GPU, которые доминируют в ландшафте существующих высокопроизводительных вычислений (HPC).

Хотя PROOT стал основным инструментом для анализа, визуализации и хранения экспериментальных данных, собранных в экспериментах по физике высоких энергий (HEP) (например, FAIRROOT и CBMROOT в GSI, BMNROOT и MPDROOT в экспериментах NICA), в рамках текущей темы 1119 был сформулирован вопрос, можно ли пакет PROOT использовать и в других физических экспериментах. Исследования Т. Соловьевой и А. Соловьева дали утвердительный ответ: PROOT может быть эффективным инструментом анализа для таких разных экспериментов, как Байкал–ГВД или малоугловое рассеяние на спектрометре ЮМО на установке ИБР-2.

Два вида результатов, представленных на конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ) 2023», Санкт-Петербург, 28–30 марта 2023 г., указывают на положительный ответ.

Доказана возможность значительного ускорения обработки данных как по количеству обрабатываемых событий, так и по количеству потоков, определяемых PROOT [115] (см. рисунок ниже) (см. также [179]).



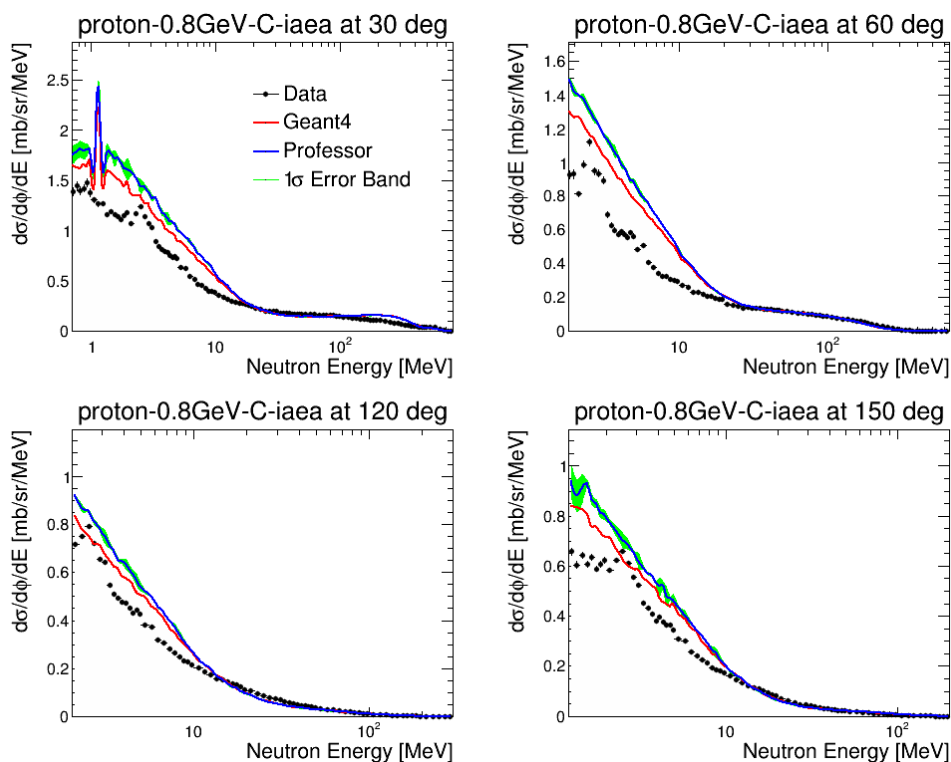
Улучшение производительности PROOT. Слева: зависимость коэффициента ускорения от количества событий; Справа: зависимость коэффициента ускорения от количества нитей [115].

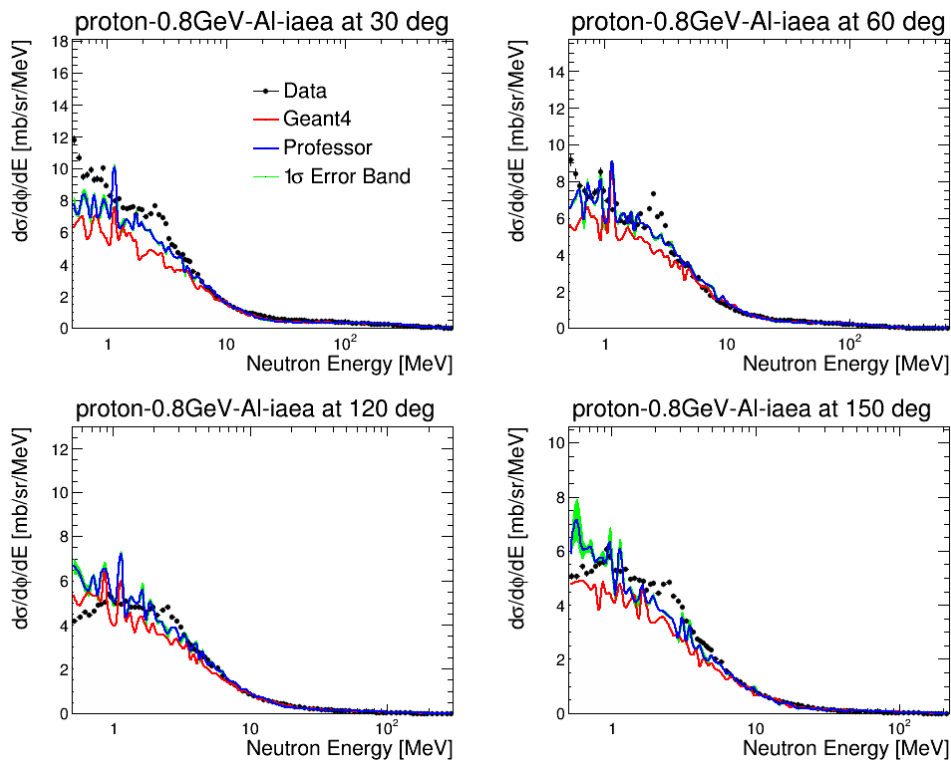
## 2.2. Пакет GEANT4 для единого моделирования крупномасштабных экспериментальных данных

### 2.2.1. Обновление пакета GEANT4 новыми модулями

Geant4 обеспечивает аппаратно-независимое моделирование экспериментов в области физики высоких энергий и медико-биологических исследований. По этой причине он является основным инструментом исследования во всех экспериментах по физике высоких энергий, независимо от того, проводятся ли они в LHC-CERN, FAIR-Darmstadt, Brookhaven или NICA-ОИЯИ. В.В. Ужинский продолжает использовать многолетний опыт ОИЯИ в области моделирования высокоэнергетических и ядерных процессов. Он является одним из основных разработчиков Geant4, с периодическим включением новых модулей в утвержденное программное обеспечение Geant4. Обновления включают новые вычислительные модули (FTF моделирование слияния нуклонов, FTF и QGS моделирование жестких процессов КХД), улучшение генератора Монте-Карло HIJING.

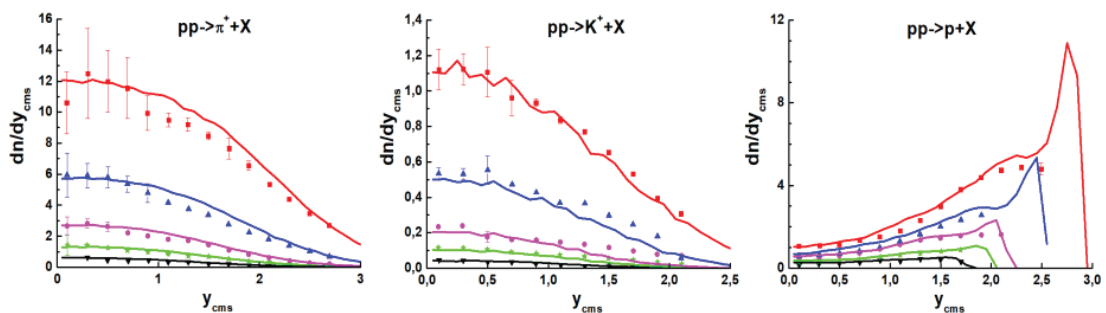
- **Настройка моделей GEANT4 с использованием фреймворка Professor [116].** Проведено исследование влияния изменения параметров в трех адронных моделях GEANT4 на согласование с наборами данных для тонких мишеней, и, используя фреймворк Professor для настройки моделей, описано соответствие этим наборам данных. Обнаружено, что при изменении параметров наборы данных согласуются значительно лучше, но для полного согласования требуется больше степеней свободы. Пример из множества предоставленных данных приведен на рисунках ниже.





Результаты подбора глобального параметра Пресотраунд по сравнению с данными МАГАТЭ 0,8 ГэВ pC --> nX и pAl --> nX в бинах угла нейтронов конечного состояния. Точки данных показаны черным цветом; Geant4 по умолчанию окрашен в красный цвет, а результат глобального подбора – в синий; зеленая полоса показывает неопределенности, полученные из неопределенностей параметров, возвращенных подгонкой.

• **Исследования и разработка генераторов событий Монте-Карло адронно-ядерных и ядерно-ядерных взаимодействий при высоких энергиях** были продолжены предложениями по усовершенствованию модели HIJING (Heavy Ion Jet Interaction Generator). Они позволяют описать экспериментальные данные коллабораций NA49 и NA61/SHINE по протон-протонным взаимодействиям. Модифицированная модель HIJING была успешно использована для анализа данных STAR о ядерных столкновениях при высоких энергиях [117] (см. рисунок ниже). Его можно использовать в экспериментах MPD и SPD (NICA).



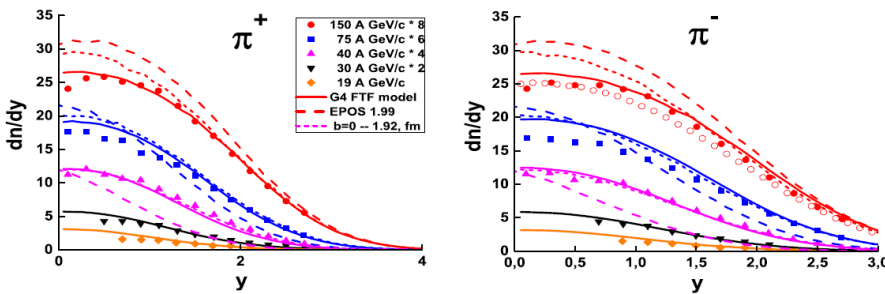
Быстротные распределения частиц в pp-взаимодействии при 158, 80, 40, 31, 20 ГэВ/с (сверху вниз, масштабировано с 16, 8, 4, 2, 1). Точки – экспериментальные данные, линии – расчеты.

### 2.2.2. Использование пакета GEANT4 для обработки данных

Описания моделей последних данных коллаборации NA61/SHINE [118] сравнивают модели HIJING, EPOS 1.99, UrQMD и Geant4 FTF. Из сравнения видно, что только последняя хорошо описывает данные NA61/SHINE по быстротным распределениям  $\pi^-$  мезонов во



взаимодействиях  $^{40}\text{Ar} + ^{45}\text{Sc}$  при  $v_{\text{NN}} = 5,2$  и  $6,1$  ГэВ. При более высоких энергиях  $v_{\text{NN}} = 7,6; 8,8; 11,9$  и  $16,8$  ГэВ эта модель занижает данные на 13%, 14%, 14% и 27% соответственно. Модель также хорошо описывает аналогичные данные для взаимодействий  $^7\text{Be} + ^9\text{Be}$  при всех энергиях ( $v_{\text{NN}} = 6,1-16,8$  ГэВ).



Быстротные распределения  $\pi^+$  и  $\pi^-$  мезонов во взаимодействиях  $^7\text{Be} + ^9\text{Be}$ . Точки – это данные, измеренные коллаборацией NA61/SHINE. Расчеты модели Geant4 FTF показаны сплошными линиями. Пунктирные линии показывают предсказания модели EPOS. Короткие пунктирные линии – расчеты EPOS для  $b = 0-1,92$  фм.

## 2.3. Программная поддержка крупномасштабных экспериментов

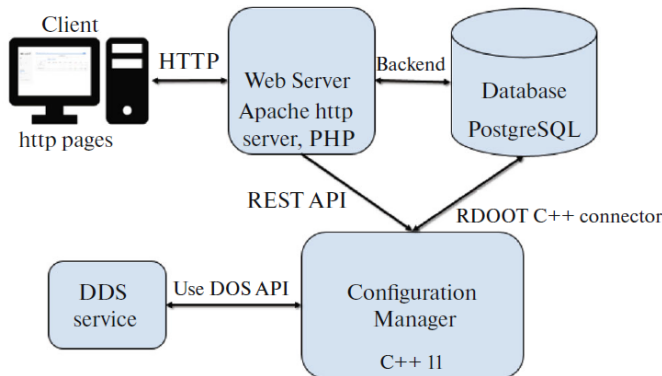
### 2.3.1. Программная поддержка всех экспериментов ОИЯИ-NICA

В то время, как внутренние группы ЛФВЭ выполняют основную часть разработки программного обеспечения, вовлечение сотрудников МЛИТ по теме 1119 в этот процесс позволило очень быстро и на очень высоком уровне решить ряд задач, которые подробно описаны ниже. Общая задача касается:

#### ► Дизайн системы метаданных событий для экспериментов NICA

Новая система метаданных событий (Event Metadata System), основанная на каталоге событий (Event Catalogue), предназначена для индексации событий экспериментов NICA и хранения их метаданных. Это позволяет осуществлять быстрый поиск по требуемым условиям и параметрам, используемым в различных физических анализах для набора физических событий, для использования в дальнейшей обработке событийных данных. Одной из важных задач разработки является интеграция системы Event Metadata System с основанными на ROOT каркасами экспериментов BM@N (BmnRoot), MPD (MPDRoot) и SPD (SPDroot). Это обеспечивает правильный множественный доступ для участников коллаборации в любой роли, масштабируемую архитектуру данных, высокую отказоустойчивость и автоматическое регулярное резервное копирование каталога событий. Внедрение информационной системы является необходимым шагом для ускорения достижения научных результатов в экспериментах NICA [119–123].

#### ► Configuration Information System (CIS) [124–126] следует из реализованной Configuration Database, неотъемлемой части комплекса информационных систем, разработанных для экспериментов проекта NICA. Он предоставляет информацию о конфигурации для сбора данных и других систем онлайн-обработки, активируя те настройки оборудования, которые необходимы в текущем сеансе эксперимента. Кроме того, система запускает описанные программные задачи в необходимой последовательности и позволяет управлять ими во время сеансов, включая передачу



последовательности и позволяет управлять ими во время сеансов, включая передачу

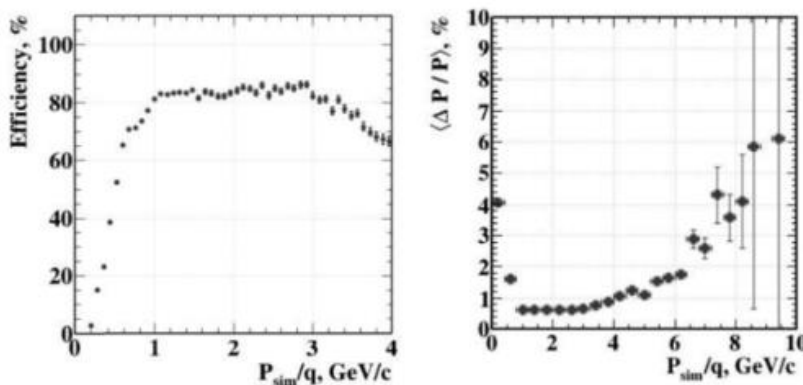
сообщений между задачами и обновление некоторых свойств. Показанная здесь архитектура информационной системы конфигурирования была реализована с использованием модели клиент-сервер, где сервер обеспечивает взаимодействие с базой данных конфигурации, а клиент разработан как веб-приложение для просмотра и редактирования параметров конфигурации пользователями.

### 2.3.2. Программная поддержка ОИЯИ-NICA: эксперимент BM@N

В международном онлайн Joint JINR Colloquium Seminar “[The Transparent Nucleus: SRC and single nucleon knockout inverse kinematics measurements using a 48 GeV/c carbon beam at JINR](#)”, прошедшем 20-ого мая 2020 г., профессор Eli Piassetzky (Tel Aviv University, Israel) сообщил о первом значимом далеко идущем эксперименте по высокоточной физике, проведенном в BM@N. В конце своего выступления, профессор Eli Piassetzky прямо отметил, по имени и по решенной задаче, заметный вклад группы МЛИТ по теме 1119, которая сделала возможным этот выдающийся научный результат в BM@N.

► **Выдержки из проделанной работы и полученных результатов в 2020 году:**

- **Реконструкция треков в эксперименте BM@N [127].** Реконструкция траекторий заряженных частиц в эксперименте BM@N является одной из наиболее важных и трудоемких задач в процедуре реконструкции событий. Она разработана в соответствии с требованиями, вытекающими из двух определенных конфигураций установки: BM@N и Short Range Correlation Program (SRC) – корреляционной программы ближнего действия – в BM@N. Алгоритм на основе ячеек разработан и включен в программное обеспечение **BmnRoot**. Случаи эффективности отслеживания треков и разрешения импульса:



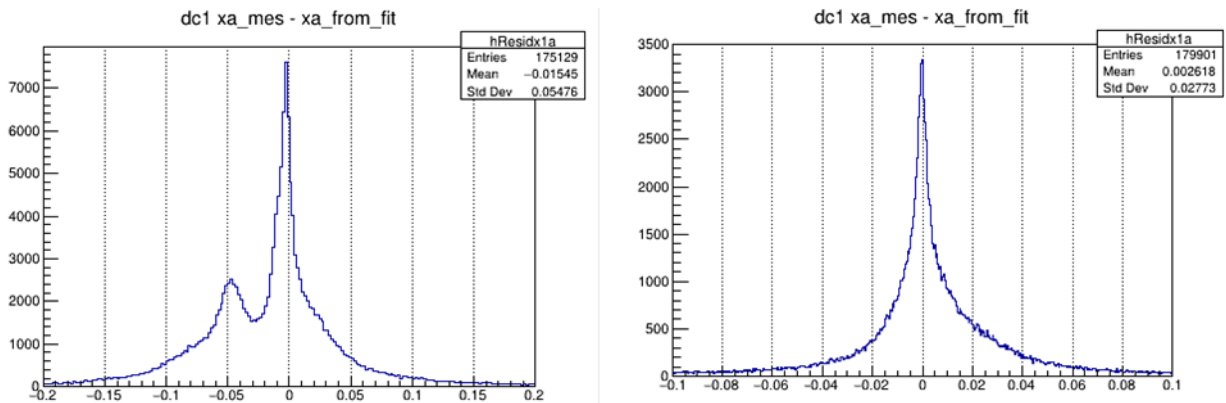
Слева: эффективность отслеживания как функция импульса.  
Справа: разрешение импульса как функция импульса.

- **Обновление геометрии внутренних трекерных детекторов установки BM@N [128,129]** касалось очень важных тем по обновлению геометрии внутренних трекерных детекторов (GEM и SILICON) установки BM@N на RUN-7 (2018 г.) и следующем запуске (2021–2022 гг.) вместе с расчетом материального бюджета для этих конфигураций.

- Были рассмотрены **полезность базы данных геометрии для эксперимента BM@N** и ее рамки ([130], см. также [131] и [132] о последних разработках). *Geometry Database* поддерживает хранение, обновление и извлечение геометрии модулей BM@N. Разработанная информационная система включает в себя базу данных, интуитивно понятные и компактные инструменты GUI и инструменты API в виде набора макросов ROOTa. **Новейший подход к разработке базы данных по геометрии [132] заключается в конструкции и реализации, охватывающей также детектор MPD.**

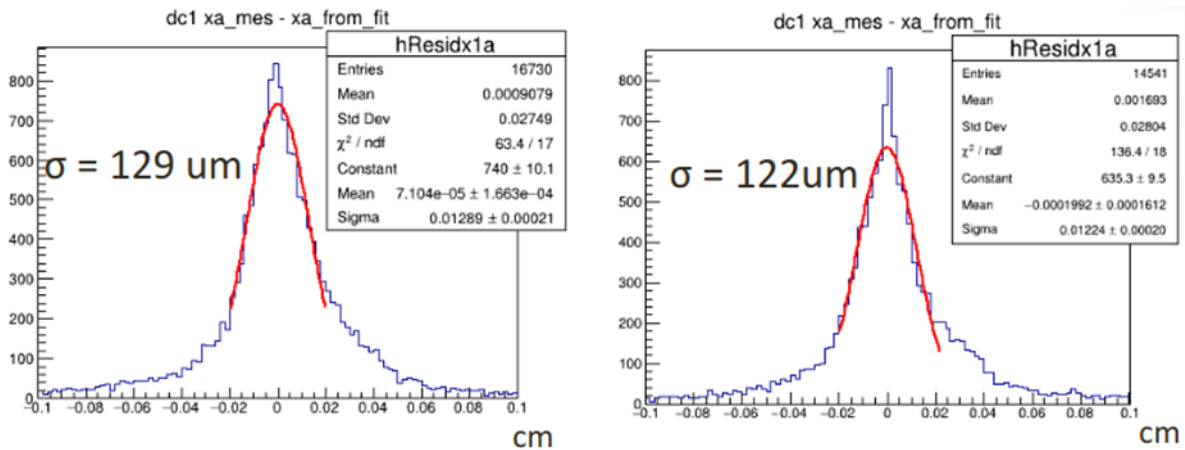
- **Выравнивание внутренней геометрии дрейфовых камер (ДК).** Выявлено наличие несоосности отдельных слоев ДК. Устранение этой несоосности повысило эффективность глобальной реконструкции треков более чем в 1,5 раза. Величина ошибок оценки импульса

частиц уменьшилась с 7,5 % до 4 % при сочетании данных ДК и GEM. Это соответствует требованиям экспериментальной точности (см. рисунок ниже).

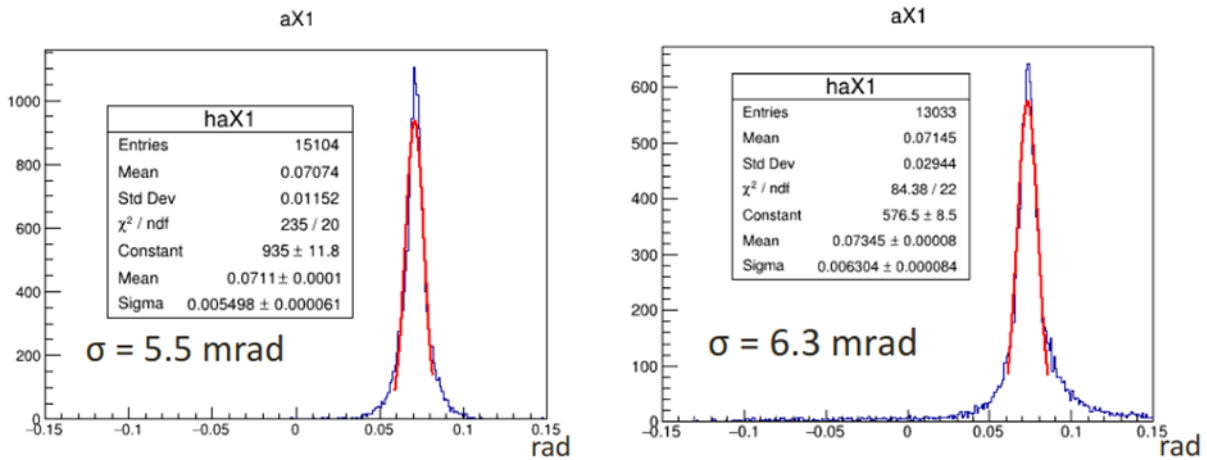


Отклонение координат из отрезка фитирования: *Слева* – до внутреннего выравнивания; *Справа* – после

Полная цепочка реконструкции была разработана для смоделированных данных в дрейфовых камерах установки VM@N Run 7. Достижение правильной настройки реконструкции смоделированных данных подтверждается хорошим соответствием между смоделированными и экспериментальными данными (см. рисунки ниже) [133].



Пространственное разрешение в плоскости x для смоделированных (*слева*) и экспериментальных (*справа*) данных



Угловое значение и разрешение для координаты x для смоделированных (*слева*) и экспериментальных (*справа*) данных

- Рассмотрена **разработка программной среды BMNROOT эксперимента BM@N [134]**. Она включает в себя хорошо разработанный и протестированный пакет программного обеспечения для моделирования, оцифровки, реконструкции и анализа событий столкновения и других вспомогательных задач. В этом отчете упоминаются четыре типа результатов, кратко изложенные ниже.

- **DCH (Drift Chamber) detector** – реализация новых кодовых модулей:
  - BmnDchTrackFinder – segment builder для дрейфовых камер,
  - BmnDchHitProducer – hit builder – конструктор хитов для смоделированных данных для дрейфовых камер,
  - BmnDchHitProducerData – конструктор хитов для экспериментальных данных для дрейфовых камер [133];

- **ROOT геометрии** (описание детектора: его структура и параметры, необходимые для моделирования методом Монте-Карло и процедур реконструкции хитов) были созданы для каждого детектора установки BM@N (GEM, DCH, STS, CSC, Silicon Detector).

- Для каждого детектора установки BM@N (GEM, DCH, STS, CSC, Silicon Detector) были выполнены специальные интенцивные **симуляции Монте-Карло** и **реалистичные симуляции**.

- **Реконструкция хитов** (для получения пространственных точек, называемых «хитами» – “hits”, из сигнала, полученного при считывании микрополосок) была выполнена для детекторов GEM, CSC и Silicon Detector.

► **Выдержки из проделанной работы и полученные результаты в 2021 году:**

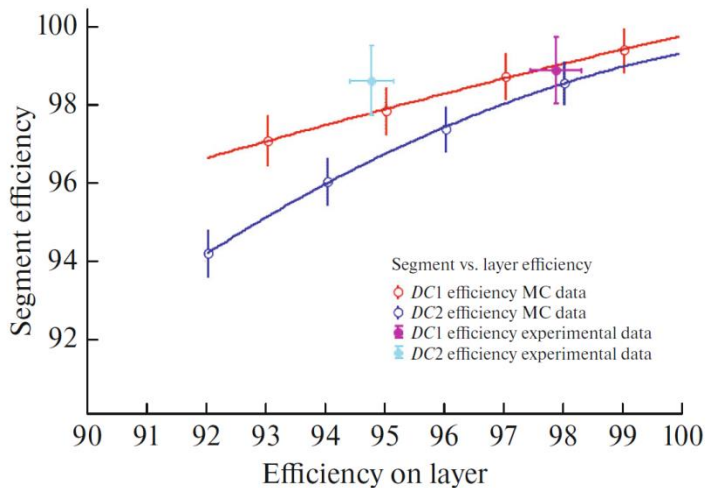
Первый эксперимент по высокоточной физике, проведенный в BM@N, сообщает о методе преодоления сложностей, возникающих из-за взаимодействия начального и конечного состояний налетающих и рассеянных частиц в экспериментах по рассеянию с выбыванием в квазисвободном рассеянии  $48 \text{ ГэВ с}^{-1} \text{ }^{12}\text{C}$  из водорода. Распределение одиночных протонов изучается на BM@N путем обнаружения двух протонов под большими углами в совпадении с интактным ядром  $^{11}\text{B}$  [135,136].

- **Разработка программного обеспечения для конфигураций установки BM@N [137,138]**

► **Выдержки из проделанной работы и полученные результаты в 2022 году:**

- **Подготовка программного обеспечения для трековых детекторов в эксперименте BM@N**, в частности, программная реализация алгоритмов реалистичного моделирования Монте-Карло и восстановления пространственных координат по плоскостям отсчета микрополосок, которые используются в этих детекторах, позволила решить специфические технические проблемы, вытекающие из запуска BM@N 2022 года [139].

- **Разработка алгоритмов и программ распознавания траекторий частиц в эксперименте BM@N [140]**. Была проведена реконструкция модельных и физических данных для ДК и катодно-стриповых камер (КСК), которые образуют внешний трекер эксперимента BM@N. Достигнуто полное соответствие реконструкции смоделированных и физических данных (это касается: остатков между реконструированным попаданием на плоскости и подобранным сегментом в ДК; распределения наклонов сегментов ДК в плоскости  $xOz$ ; разницы в сегментах-наклонах двух камеры; оценка импульса пучка С).

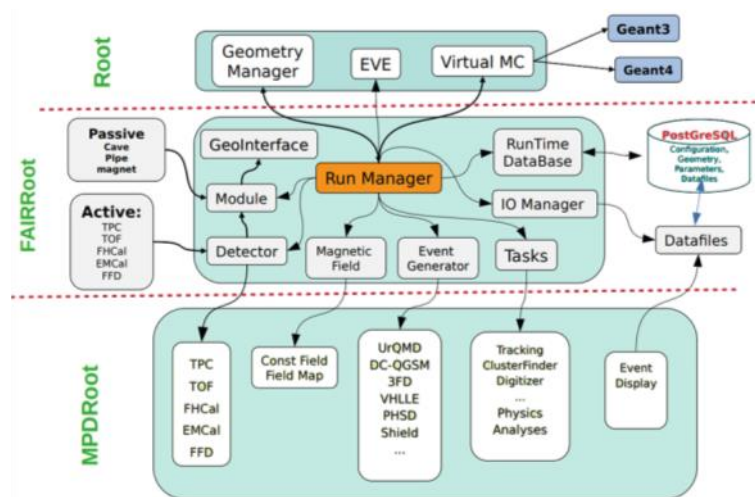


Эффективность реконструкции сегмента по сравнению с эффективностью попадания на слой. Результаты для данных МК для первой ДК показаны красным цветом, а результаты для второй ДК показаны синим цветом. Результаты для экспериментальных данных выделены пурпурным и голубым цветом соответственно. Несколько более низкая эффективность во второй ДК вызвана наличием системы ToF700 между двумя камерами.

### 2.3.3. Программная поддержка ОИЯИ-NICA: эксперимент MPD

► Разработка и обширные испытания нового **генератора столкновений тяжелых ионов методом Монте-Карло DCM-SMM** [141–143] (последние разработки см. также в [144,145]). Новый генератор Монте-Карло, DCM-SMM, создан авторским коллективом с целью предоставить проектам NICA эффективный инструмент для оптимизации элементов детектора, отладки алгоритмов реконструкции событий, прогнозирования эффективности, расчета отношения сигнала к фону, определяя наилучшие критерии отбора событий. Генератор DCM-SMM активно используется группами детекторов VM@N и MPD. На кластере HybriLIT были смоделированы десятки миллионов ядерных столкновений для реакций углерода (C), аргона (Ar) и криптона (Kr) с C, Al, Cu, Pb.

► **Единая разработка программного обеспечения для эксперимента MPD в NICA (MPDRoot)** [147]



Программная среда MPDRoot обеспечивает моделирование, реконструкцию и физический анализ эксперимента MPD на коллайдере NICA. Она должна быть достаточно гибкой, устойчивой, надежной, чтобы ее можно было использовать, развивать и обслуживать в течение всего времени проведения эксперимента и анализа его данных. Реализована эффективная автоматизация сборки, настройки и установки программного обеспечения (DevOps) для разработки и использования MPDRoot. Типичные операции MPDRoot DevOps, которые ранее были громоздкими и трудоемкими, сокращены до выполнения нескольких команд, сопровождаемых кратким руководством по развертыванию, что значительно

снижает вероятность ошибок на стороне конечного пользователя и разработчика. Основным преимуществом текущей реализации является ее широкая совместимость и полная модульность, упрощающая обслуживание, обновление и выявление источника потенциальных проблем в будущем. Характерные черты:

- все пользователи и разработчики теперь работают с одними и теми же версиями пакетов зависимостей, созданных в одной и той же унифицированной среде;
- быстрая, удобная установка;
- вообще не требуется сборка и настройка для обычных пользователей (не разработчиков);
- ничего, кроме сборки свежей ветки разработки из репозитория git, не требуется для разработчиков с гораздо меньшей конфигурацией, чем раньше;
- меньшая вероятность ошибок при установке, меньше затрат времени на поддержку;
- простое обновление, меньшее техническое обслуживание;
- новые коммиты гарантированно работают на других машинах после прохождения конвейера CI, что устраняет необходимость тестирования на нескольких ОС.

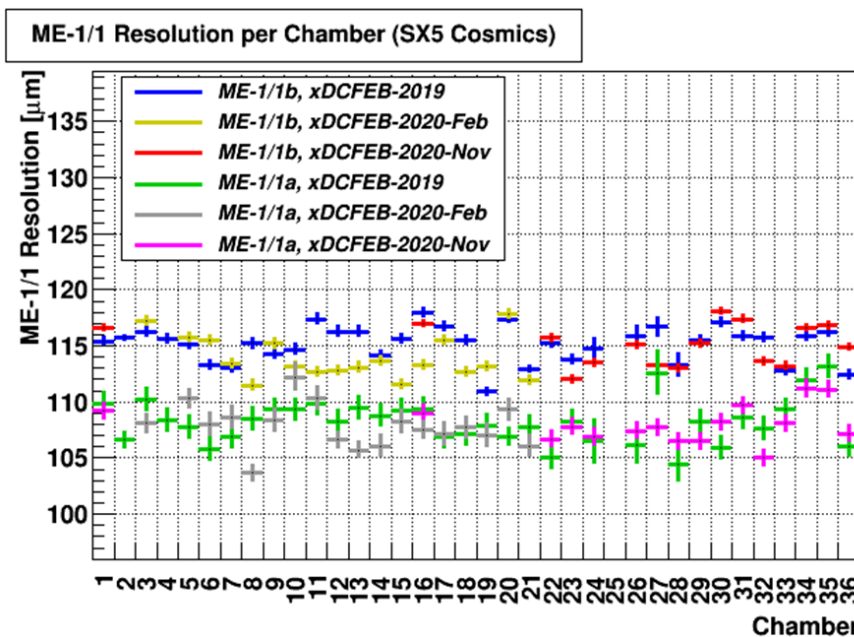
Статья [147] расширяет результаты, ранее опубликованные в [146].

► **Состояние и начальные исследования физических характеристик эксперимента MPD в NICA [148].** Дан обзор области исследования фазовой диаграммы КХД в области максимальной барионной плотности, где NICA и MPD смогут внести существенный и уникальный вклад. Также предоставляются подробные описания настройки MPD, включая его различные подсистемы, а также его вспомогательную и вычислительную инфраструктуру. Отдельные исследования производительности для конкретных физических измерений в MPD представлены и обсуждаются в контексте существующих данных и теоретических ожиданий.

#### **2.3.4. Программная поддержка LHC: эксперимент CMS**

- **Работа, проделанная в течение 2020 года в рамках эксперимента CMS, включала**
  - Разработка, тестирование и реализация в официальном программном обеспечении CMS алгоритмов разделения перекрывающихся сигналов и построения сегментов треков в КСК.
  - В рамках программы CMS Modernization Phase 2 физики ОИЯИ в 2020 г. участвовали в переоборудовании электроники и системы охлаждения мюонной станции КСК ME1/1. Испытания собранных камер проводились на космических лучах.

Результаты по пространственному разрешению камер показаны ниже. Оценка фоновых загрузок в КСК основана на экспериментальных данных LHC. (В сотрудничестве с Михаилом Игнатенко – Калифорнийский университет, Лос Анджелес, США).

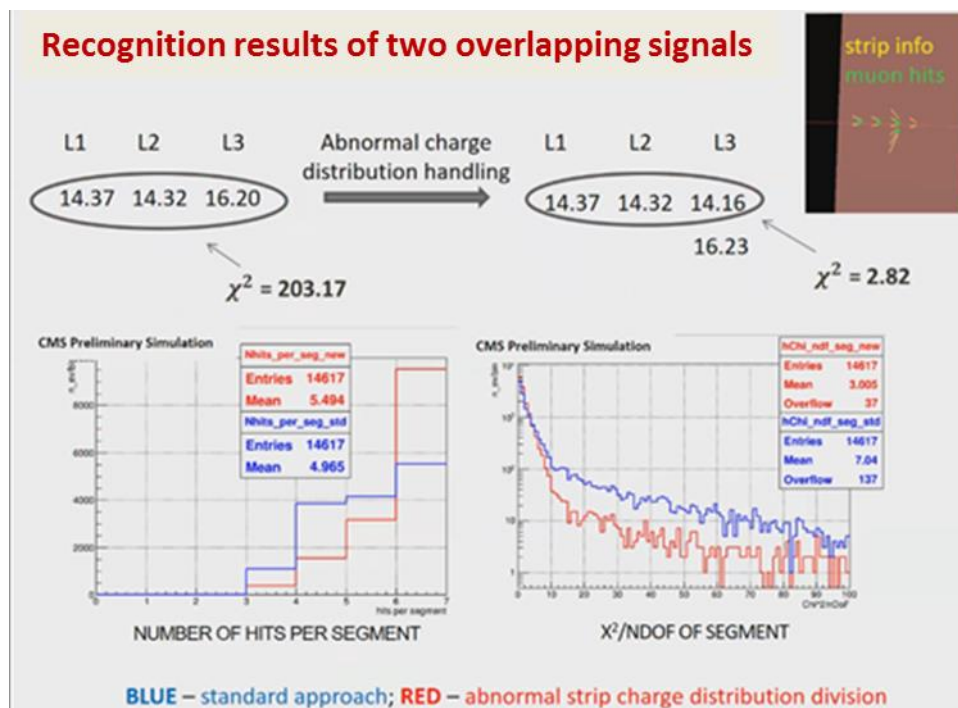


Пространственное разрешение камер станции ME-1/1 по космическим лучам. Результаты, полученные в 2020 году, хорошо согласуются с результатами 2019 года.

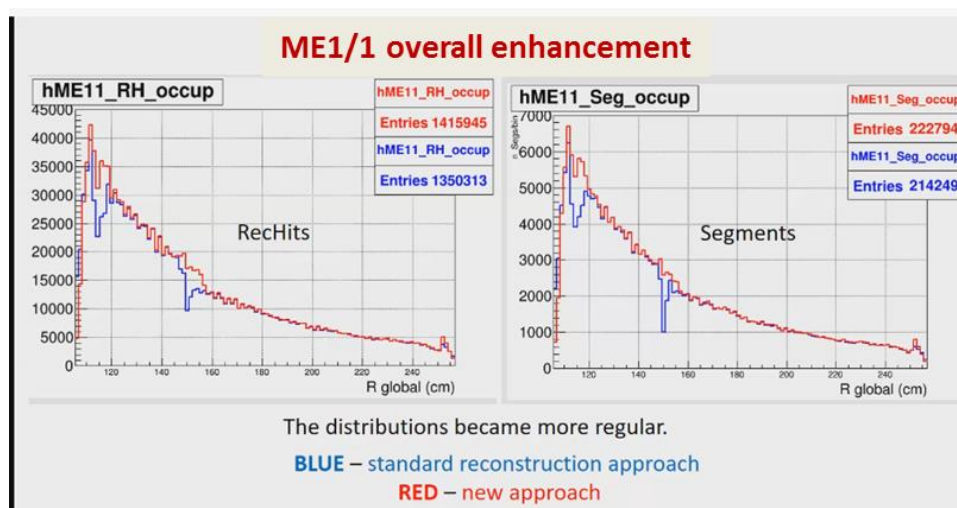
Помимо публикаций коллаборации CMS [149–159] с важным вкладом авторов по теме 1119 (В. Пальчик и Н. Войтишин), следует также упомянуть работу [160].

- Работа, проделанная в течение 2021 года в рамках эксперимента CMS, включала [161]:

- Предложены алгоритмы улучшения реконструкции хитов в КСК. Значительное улучшение нового алгоритма очевидно.



- Улучшение обработки данных КСК мюонной станции ME1/1. Все улучшения были реализованы в официальном программном обеспечении CMS и будут использоваться по умолчанию, начиная со сбора данных Run3.



- Работы, выполненные в течение 2022 г. в рамках эксперимента CMS [162], касались реконструкции физических событий, связанных с разработкой, тестированием и реализацией нового алгоритма построения сегментов трека в КСК для установки CMS. Работы по настройке реконструкции треков и оценке параметров работы новых детекторных касет HGCal CMS в тестовом модуле на космических мюонах включали детальное моделирование тестовой установки с определением оптимальных размеров для последующего тестирования новых детекторов.

### 2.3.5. Программная поддержка LHC: эксперимент ATLAS

Разработки ведутся в рамках трех проектов ATLAS, которые будут активны до 2024 года. Организуются периодические встречи с участием МЛИТ и доклады как в ЦЕРН [163], так и в ОИЯИ [164].

- Задачи, решаемые в течение 2020 года в рамках эксперимента ATLAS, включали:
  - **TDAQ**, члены СС по контролю и настройке, группам мониторинга [165]
    - Улучшения оперативного мониторинга по обращениям пользователей;
    - Модернизация сервиса визуализации данных для системы мониторинга сетевого трафика в ATLAS (**NETIS**).
  - **Condition DB** – Разработка программного обеспечения для преобразования данных COOL в данные CREST в рамках усовершенствования ConditionDB для RUN3 и создания пользовательских библиотек Athena. Серверная библиотека CREST была включена в официальный релиз автономной системы ATLAS (Athena) в декабре 2019 года. В 2020 году была проведена работа по созданию скрипта для автоматического преобразования полного объема данных для запуска тестовой разработки Athena q431 COOL в алгоритм преобразования CREST для большого количества каналов IOV и данных для одного каталога.
  - **Event Index (EI3)** – EventIndex для LHC Run 3 [166]. Прделанная работа касается:
    - Модернизация триггерной системы обработки информации для индексации в EventIndex для данных Монте-Карло.
    - Решение проблем пользователей, работающих с системой EventIndex (поддержка производства EventIndex, совместно с Ф. Прокошиным, ЛЯП).
    - Начало разработки сервера тестовой среды для нового прототипа Event Index.

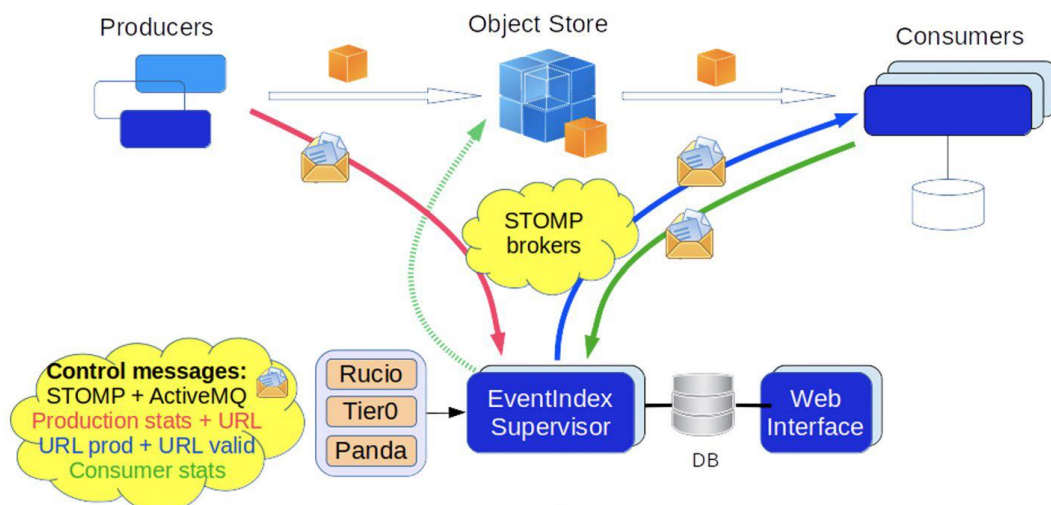


• **Задачи, решаемые в течение 2021 года в рамках эксперимента ATLAS, включали [167–169]:**

- **TDAQ** – В рамках участия в работе группы TDAQ ATLAS по модернизации программного обеспечения для RUN3 проведено обновление компоненты Resource Manager в соответствии с новыми правилами по поддержке безопасности: использование daq-token механизма при передаче имени пользователя с клиента на сервер с обращением к Access Manager.
- **Condition DB** – Продолжены работы по конвертированию данных из старого формата в CREST и совершенствованию соответствующего инструментария.
- **Event Index (EI3)** – EventIndex для LHC Run 3.  
Продолжено участие в проекте ATLAS EventIndex, разработан новый сервис EventPicking, автоматизирующий процедуру поиска местоположения событий с помощью EventIndex и отправки заданий в PANDA для получения запрошенных событий.

• **Задачи, решаемые в течение 2022 года в рамках эксперимента ATLAS, включали [170]:**

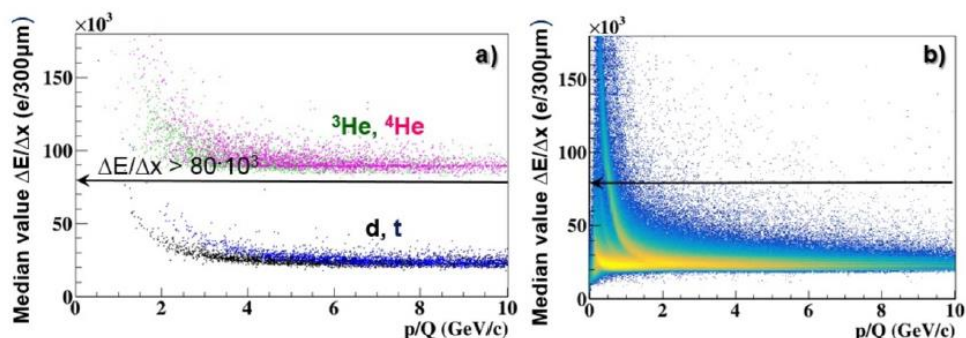
- **TDAQ** – В рамках участия в работе группы TDAQ ATLAS по модернизации ПО для RUN3–RUN4 проведена модификация компоненты Resource manager. В соответствии с новыми требованиями модифицирован алгоритм старта сервера, отредактированы для соответствия последним версиям компоненты Configuration конфигурационные файлы, связанные с ресурсами, проведены изменения использования механизма daq-token по результатам тестирования в testbed.
- **Проект CREST (ATLAS Condition Database)** – Продолжены работы по конвертированию новых типов данных в CREST, проведены модификации алгоритмов для работы с новыми версиями сервера CREST.
- **Проект ATLAS Event Index** – Продолжено участие в проекте ATLAS EventIndex, проведены работы по улучшению сервиса EventPicking, расширены типы принимаемых на обработку событий, уменьшено число ситуаций, требующих вмешательства экспертов.



Архитектура системы сбора данных EventIndex на базе Object Store [170].

### 2.3.6. Программная поддержка FAIR: эксперимент CBM

• Точное измерение выхода гиперядер и их времени жизни в эксперименте CBM (Compressed Baryonic Matter) основано на идентификации продуктов их распада, в том числе  ${}^3\text{He}$  и  ${}^4\text{He}$ . Исследована возможность идентификации тяжелых фрагментов методом потерь энергии в детекторе STS. Критерий  $\omega(k,n)$  был успешно адаптирован для отделения двухзарядных частиц от однозарядных. Сочетание метода потерь энергии с критерием  $\omega(k,n)$  показало высокий уровень подавления фона без существенных потерь сигнала. Комбинация информации с детекторов TOF и STS позволила выделить  ${}^3\text{He}$  и  ${}^4\text{He}$  из дейтронного фона [171].



Зависимости медианного значения  $\Delta E/\Delta x$  от импульса частицы для а) сигнала ( ${}^3\text{He}$ ,  ${}^4\text{He}$ ), тепловых дейтронов и тритонов и б) треков UrQMD [171].

• Предложен простой и эффективный триггерный вариант регистрации редких событий  $J/\psi \rightarrow \mu^+\mu^-$  в эксперименте CBM. Для его реализации требуется только информация, зафиксированная датчиками координат станции MUCH [172].

### 2.3.7. Программная поддержка FAIR: эксперимент PANDA

• Моделирование UrQMD + SMM [173,174].

## 2.4. Вычислительная поддержка внутренних проектов в физике конденсированного состояния и радиобиологических исследований

Начиная с 2020 года группа ЛИТ (руководитель О.И. Стрельцова) разработала и внедрила выделенную информационную систему (ИС) поверх экосистемы ML/DL/HPC, разработанной в рамках Темы 1119, на платформе HybriLIT (раздел 3.1).

► Активно продолжается создание информационной системы для задач радиационной биологии – совместный проект ЛИТ и ЛРБ ОИЯИ, стартовавший в 2020 году.

• Первый этап касался проектирования информационной системы (ИС) для радиобиологических исследований [175]. Разработанная ИС обеспечивает: хранение и доступ к экспериментальным данным и методам их обработки; обеспечение комплекса методов систематизации результатов экспериментов и выявления скрытых закономерностей, возникающих в ответных реакциях биологических систем на воздействие повреждающих факторов; представление данных в удобном для комплексного статистического анализа виде; возможности автоматизации исследований на основе методов машинного и глубокого обучения и нейросетевых подходов; комфортную среду для взаимодействия и сотрудничества различных исследовательских групп.

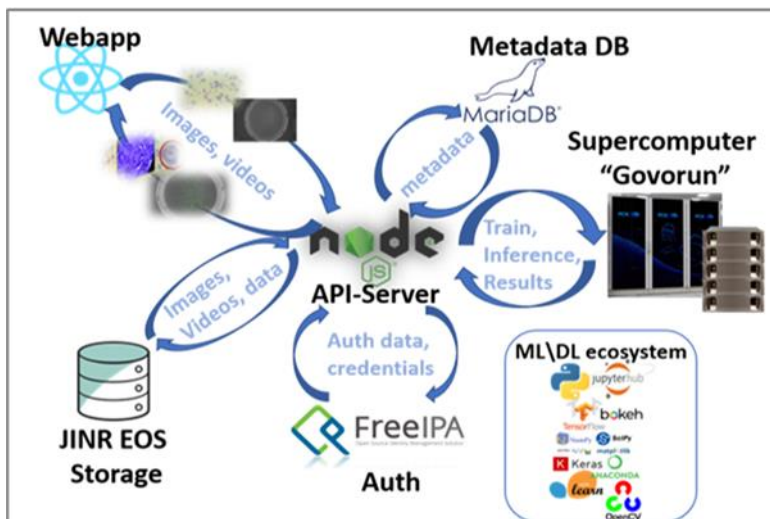
- В рамках совместного проекта ЛИТ и ЛРБ на базе экосистемы ML/DL/HPC разработана информационная система для задач радиационной биологии. Модуль для изучения поведенческих паттернов мелких лабораторных животных, подверженных радиационному воздействию позволяет автоматизировать анализ видеоданных, получаемых при тестировании грызунов в различных тест-системах, одной из которой является «Открытое поле». Вместе с методами компьютерного зрения предложен способ разметки арены на основе определения ключевых точек на базе нейросетевого подхода [176].

- Нынешняя ИС включает в себя две сильные стороны, включающие:
  - алгоритмы компьютерного зрения на основе технологий ML/DL;
  - современные ИТ-решения для хранения, обработки и визуализации данных.

На основе разработанной ИС были достигнуты упрощение и ускорение для следующих классов задач:

- обработка экспериментальных данных осуществляется путем автоматизированной морфологической классификации нервных клеток;
- анализ данных осуществляется с помощью новейших нейросетевых алгоритмов, построенных на существующей экосистеме ML/DL;
- возможность одновременной обработки данных разными исследовательскими группами;
- систематизация и разработка эффективных методов предотвращения и противодействия негативному воздействию ионизирующих излучений.

Три основных этапа исследования: сбор экспериментальных данных, их анализ и интерпретация полученных результатов выполняются в рамках комплексного подхода, в основе которого лежат элементы вычислительной инфраструктуры HybriLIT, обобщенные на рисунке ниже [194]:



## 2.5. Вычислительная поддержка проектов ОИЯИ по физике конденсированного состояния

Основная часть экспериментальных исследований по физике конденсированного состояния в ОИЯИ основана на зондировании образцов на специализированных детекторных системах медленными нейтронами реактора ИБР-2 (ЛНФ). ИТ-поддержка ученых ЛИТ распространяется на два наиболее востребованных детектора ИБР-2: ЮМО и HRFD.

Недавняя модернизация ЮМО, заключающаяся в добавлении системы позиционно-чувствительных датчиков, повлекла за собой резкое увеличение ИТ-поддержки исследований А. Соловьевым и Т. Соловьевой, которые разработали и внедрили концептуально новые ИТ-решения.

ИТ-разработки, задуманные и реализованные в течение 2020 года В.Б. Злоказовым, обеспечили стабильную, эффективную и быструю обработку данных с помощью Фурье-дифрактометра высокого разрешения (High Resolution Fourier Diffractometer – HRFD).

► **SAS – пакет обработки данных малоуглового рассеяния нейтронов**, с обновлениями до 2023 г., включен в библиотеку программ JINRLIB [177,178]. Онлайн обработка данных на спектрометре ЮМО (четвертый канал реактора ИБР-2) осуществляется с помощью пакета SAS. Этот комплект интенсивно модернизировался в соответствии с последующими разработками или модификациями спектрометра ЮМО. Программа позволяет объединять данные, относящиеся к одному и тому же образцу, рассчитывать функцию разрешения спектрометра для заданных условий эксперимента, проводить коррекцию данных по мертвым временам нейтронных детекторов, а также вычитать фон из данных детектора, проводить нормализацию полученного спектра на стандартный ванадиевый рассеиватель, для вычитания фоновых данных образца.

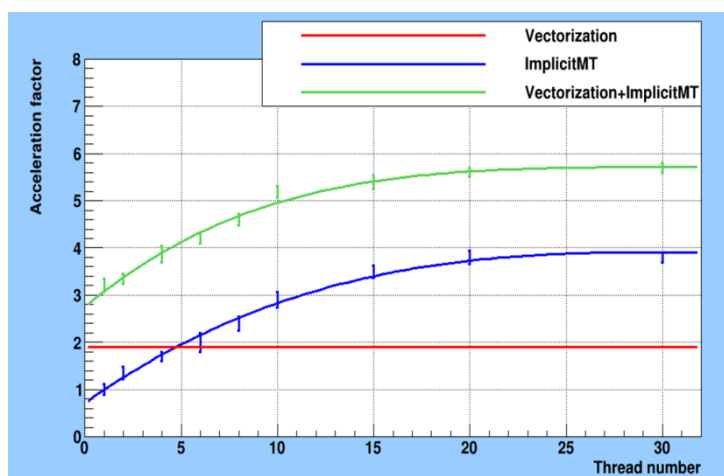
► **Разработка программного обеспечения на основе веб-технологий** является перспективным направлением, предоставляющим пользователю широкий спектр возможностей по обработке экспериментальных данных.

Значительный прогресс достигнут в модернизации спектрометра малоуглового рассеяния ЮМО на установке ИБР-2 в ЛНФ ОИЯИ. Ниже приведены два примера.

• JINRLIB **FITTER\_WEB**, программа для фитирования экспериментальных данных, полученных на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов [178], реализованная в виде Web-приложения [09. 11. 2022; авторы: А.Г. Соловьев, Т.М. Соловьева]. Программа доступна в GitLab: <https://git.iinr.ru/yumo/fitter-next>.

• **Модернизация программного обеспечения для фитирования данных спектрометра малоуглового рассеяния нейтронов ЮМО на ИБР-2** осуществляется путем разработки веб-приложения.

Настоящая работа посвящена описанию варианта программы, позволяющей отдельно оценивать полидисперсность и разрешающую способность. Включение полидисперсности является важным шагом вперед в онлайн-анализе данных. Векторизация функций и неявная многопоточность пакета PROOT повышают скорость обработки данных до 5,5 раза [179].



Зависимость коэффициента ускорения от количества потоков [179].

► **Эксперименты, проводимые на Фурье-дифрактометре высокого разрешения (HRFD)**, включают изучение необратимых процессов, в ходе которых спектроскопические данные быстро изменяются. Совсем недавно был поставлен вопрос о максимально возможной автоматизации обработки данных (интерактивное определение исходных данных, визуализация полученных данных и т. д.) в различных условиях таких экспериментов. В течение 2020 года В. Злоказовым было разработано и внедрено автономное программное обеспечение для пакетной обработки спектров нейтронной дифракции, измеренных в режиме реального времени в натурном режиме.

## 2.6. Программно-вычислительная поддержка проекта нейтринной физики Байкал–ГВД

Данные, накопленные в ходе эксперимента Байкал–ГВД, охватывают широкий спектр информации, требующей интенсивной компьютерной обработки: оценка положения компонентов подводного детектора объема кубический километр, испытывающих дрейф и изменение пространственной ориентации. О прогрессе, достигнутом в течение 2020 года, сообщалось в [180–183].

• **Обработка данных нейтринного телескопа Байкал–ГВД**, нуждающаяся в четкой связи между его различными модулями, была модернизирована благодаря вкладу ЛИТ. Это обеспечивает существенное ускорение основного кода Cascade Recovery Collaboration, что важно для отслеживания транзиентных астрофизических источников нейтрино [184].

## 2.7. Поддержка обработки и анализа данных экспериментальной ядерной физики

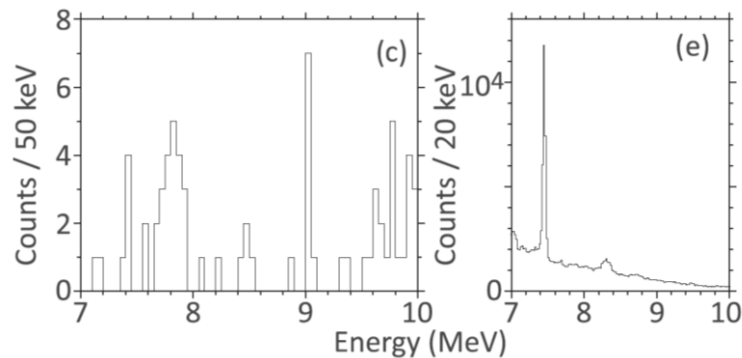
*Собранные на установках ЛЯР данные о низкоэнергетических ядерных процессах (рождение и характеристика сверхтяжелых ядер, столкновения экзотических ядер с протонами и ядрами, фрагментация ядер и т. д.) требуют, как правило, разработки новых теоретических моделей. Большая часть прогресса в разработке новых математических моделей, посвященных этой цели, вместе с иллюстрацией охвата конкретных экспериментальных процессов была представлена в разделе 1.2.2. настоящего доклада. Описание функций, связанных с конкретной реализацией кода для высокопроизводительных вычислений на платформе HybriLIT, приведено в разделе 3.1.*

### ► **Надежные статистические выводы при низкой статистике и неполном наблюдении**

Развитие описанных непараметрических методов неразрывно связано с необходимостью надежной интерпретации при создании и характеристике сверхтяжелых ядер. Основными особенностями таких данных являются малая статистика, их большая неопределенность и сложность. Предложенный непараметрический критерий «медиана/среднее», для проверки достаточно большого класса распределений данных на чистоту, удобен для использования при анализе статистики малых данных, характеризующейся отсутствием априорной информации [185].

► **Интерпретация статистических данных, собранных в ходе первого эксперимента на Фабрике сверхтяжелых элементов в ЛЯР**, показала **высокое сечение**  $^{288}\text{Mc}$  в реакции  $^{243}\text{Am} + ^{48}\text{Ca}$  и привела к **идентификации нового изотопа**  $^{264}\text{Lr}$  [186]. Следующая выдержка из

опубликованных данных свидетельствует о неслучайном характере разрешенного в ходе эксперимента пика 7,6–8,0 МэВ (Fig. 1(c) [186]), что согласуется с резким увеличением числа отсчетов (Fig. 1(e) [186]).



Выдержка из Fig. 1 [186]. Слева: на рис. 1(c) представлено статистическое распределение  $\alpha$ -подобных событий, зарегистрированных в диапазоне энергий  $E_\alpha = 7\text{--}10$  МэВ. Структура, разрешенная в диапазоне 7,6–8,0 МэВ, указывает на неслучайный характер накопленных записей. Справа: на рис. 1(e) представлен спектр суммированных  $\alpha$ -подобных событий, зарегистрированных во всех запусках эксперимента. Эта функция подтверждает вывод, сделанный на основе данных слева.

#### ► Реакции фрагментации ионов на фрагменторазделителе COMBAS ЛЯР [187–192].

##### Моделирование полных сечений реакций нейтронно-избыточных легких ядер [187].

Полные сечения реакций для ядер-снарядов от  $^4\text{He}$  до  $^{12}\text{B}$  в диапазоне энергий 10–50 АМэВ и мишени  $^{28}\text{Si}$  сравниваются с модельными предсказаниями, основанными на формуле Кокса и расчетах MOMDIS.

Проведен анализ скоростей и изотопных распределений легких осколков, полученных в реакциях снарядной фрагментации  $^{18}\text{O}$  при энергии 35 МэВ/нуклон на мишенях  $^9\text{Be}$  и  $^{181}\text{Ta}$ . Предложена параметризация спектров скорости как суммы двух гауссианов, представляющих диссипативную и прямую составляющие реакции. Показано, что центры диссипативной составляющей достаточно хорошо описываются в комбинированной модели BNV+SMM. Соотношение диссипативных и прямых мод позволяет лучше понять механизм этих реакций [188,189].

Сообщалось также о результатах реакций фрагментации снарядов  $^{22}\text{Ne}$  (42 МэВ/нуклон) на мишенях  $^9\text{Be}$  и  $^{181}\text{Ta}$  [190] и  $^{40}\text{Ar}$  (36,5 МэВ/нуклон) на мишенях  $^9\text{Be}$  [191]. Обнаружена конкуренция между различными механизмами реакции. Полученные сечения образования были сопоставлены с моделями эмпирической параметризации сечения фрагментации (EPAX) и исследования пространства в фазе тяжелых ионов (HIPSE). Были выявлены конкретные ограничения двух моделей параметризации.

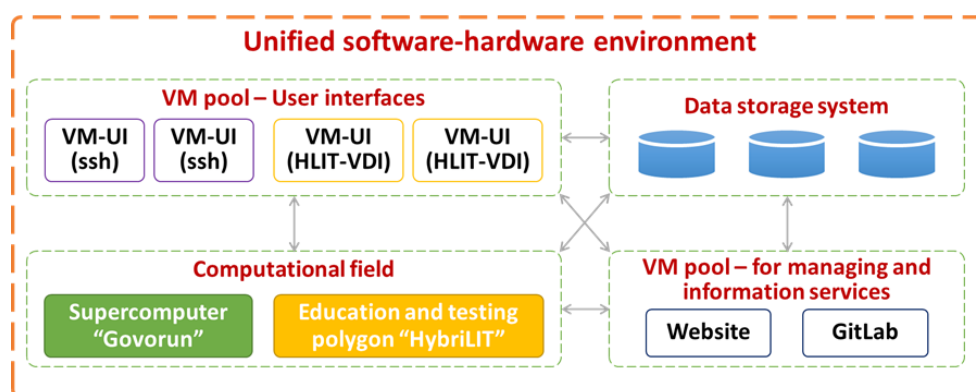
► **Моделирование выхода радиоактивных изотопов на экспериментальных установках.** Имея в виду необходимость получения точных данных о выходе радиоактивных изотопов в системах, работающих на ускорителях, авторы используют в качестве основного инструмента моделирования разработанный в ОИЯИ пакет CASCADE. Проведено сравнение с экспериментальными данными и с другими методами моделирования, подробно обсуждены полученные результаты [192].

### 3. Численные методы, алгоритмы и программы для многоядерных и гибридных архитектур и аналитика больших данных

#### 3.1. Экосистема ML/DL/HPC на вычислительной платформе HybriLIT

В рамках проекта ЛИТ «Многофункциональный информационно-вычислительный комплекс (МИВК)», гетерогенная вычислительная платформа (ГВП) HybriLIT, в состав которой входят учебно-тестовый полигон HybriLIT и суперкомпьютер «Говорун», <http://hlit.jinr.ru>, представляет собой основные аппаратные средства, обеспечивающие реализацию передового программного обеспечения для численного решения вновь разрабатываемых математических методов и алгоритмов в ОИЯИ и, в частности, по теме 1119. **Проектирование, разработка, внедрение и сопровождение на HybriLIT HPC удобной для пользователя окружающей среды** является фундаментальной задачей, решение которой поэтапно решается и уточняется в рамках Темы 1119 выделенным коллективом (руководители Д.В. Подгайный, О.И. Стрельцова).

Опыт, полученный в ходе постепенного расширения кластера HybriLIT, показал, что разработка **единой, масштабируемой, модульной процедуры** управления программно-информационной средой является лучшим решением для управления всем HPC HybriLIT [193]. Его модульная структура показана на рисунке ниже [194].



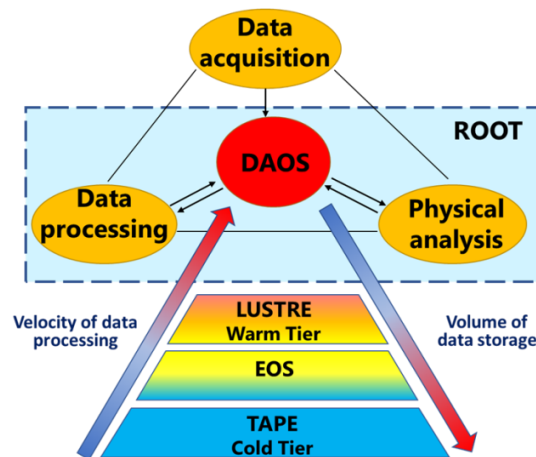
Единая программно-информационная среда HybriLIT HPC позволяет пользователям исследовать возможности новых компьютерных архитектур, ИТ-решений, разрабатывать и отлаживать свои решения на учебно-тестовом полигоне, а затем производить расчеты на суперкомпьютере «Говорун». Это позволяет эффективно использовать ресурсы СК «Говорун» [194].

Эта идея процедуры управления была дважды успешно опробована. Первым случаем было создание HybriLIT HPC путем добавления исходной версии суперкомпьютера «Говорун», характеризующейся тройной гетерогенной структурой: (i) компонентой CPU Intel Gold – **SkyLake** – предназначенной для реализации пакетов высокопроизводительных вычислений (HPC) с распределенной памятью; (ii) компонентой CPU Intel Phi – **KNL** – предназначенной для реализации пакетов HPC с *общей памятью*; и, что не менее важно, (iii) компонентой ускорителя GPU NVIDIA – **DGX** – предназначенной для реализации пакетов HPC с использованием методов *нейронных сетей*, основанных на *машинном обучении* и *глубоком обучении* (ML/DL). Удобный доступ пользователя к любой из этих трех возможностей, предлагаемых суперкомпьютером «Говорун», был обеспечен собственной разработкой *специализированных экосистем* в первой половине 2020 года. Экосистема, предназначенная для решения задач ML/DL, состоит из двух отдельных частей: *вычислительной компоненты* (см. <https://jhub2.jinr.ru>) и *компоненты разработки* (см. <https://jhub.jinr.ru>). Также была создана среда HPC для **простой разработки параллельных алгоритмов** и приложений, особенно для будущих экспериментов на установке NICA [195–197].

Работа первой «очереди» суперкомпьютера «Говорун» позволила проводить ресурсоемкие вычисления для решеточной квантовой хромодинамики, повысить эффективность моделирования динамики релятивистских столкновений тяжелых ионов, ускорить генерацию и реконструкцию событий для mega-science экспериментов проекта NICA, проводить расчеты радиационной безопасности экспериментальных установок ОИЯИ, значительно ускорить исследования в области радиационной биологии [198,199] и других научных и прикладных задач [200].

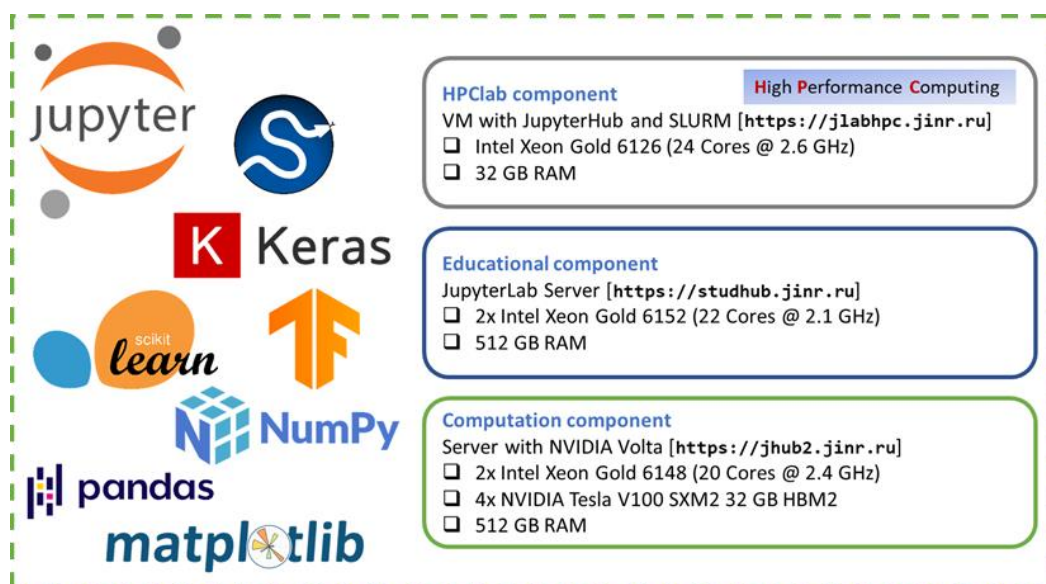
Второй успешной проверкой идеи этой процедуры управления стала существенная модернизация процессорной части суперкомпьютера «Говорун» в 2022 году. По сути, это добавило 32 гиперконвергентных вычислительных узла (расширение вычислительного поля) и 8 распределенных узлов хранения (для расширения и ускорения иерархического хранилища). С этой новой структурой, новый слой, программное обеспечение DAOS (Distributed Asynchronous Object Storage), был построен на существующей LUSTER EOS, что сделало СК «Говорун» одним из самых эффективных суперкомпьютеров в мире (48-е место в мире в настоящее время, см. IO<sup>500</sup> List – ноябрь 2022 г., <https://io500.org/>).

В новой конфигурации СК «Говорун» существенно ускоряется поток данных для экспериментов по физике высоких энергий (см. рис. ниже) [194].



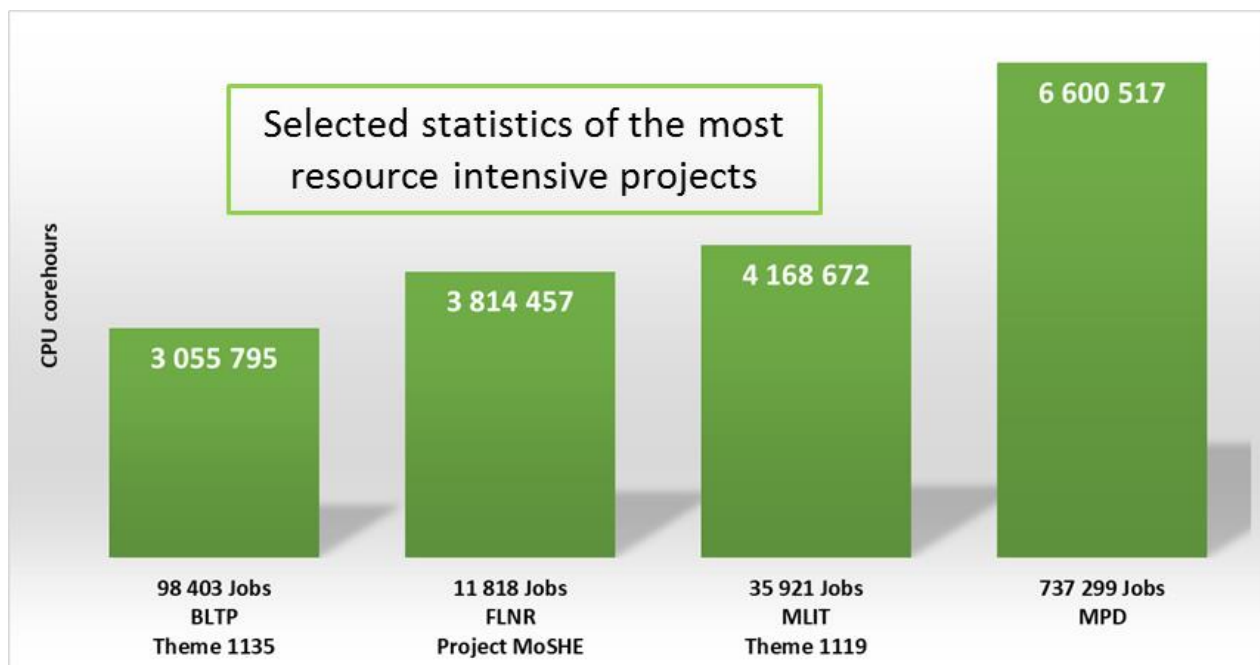
Дополнительные сведения об успешном использовании суперкомпьютера «Говорун» для решения задач ОИЯИ приведены в [194].

Основные компоненты Экосистемы ML/DL/HPC, созданной в рамках темы 1119 для решения задач СК «Говорун», включают ресурсы, представленные на рисунке ниже [194].





Использование ресурсов суперкомпьютера «Говорун» востребовано всеми лабораториями ОИЯИ в рамках 25 тем Проблемно-Тематического плана ОИЯИ. Существует четыре класса проектов, требующих наиболее интенсивного использования этих ресурсов: мегапроект NICA, моделирование сложных физических систем, расчеты свойств атомов сверхтяжелых элементов и расчеты решеточной квантовой хромодинамики. Доля наиболее ресурсоемких проектов приведена ниже [194].



## 3.2. Разработки на основе Экосистемы ML/DL/HPC

### 3.2.1. Расширенные возможности использования экосистемы ML/DL/HPC на базе JupyterHub

► В обзоре [201] обсуждаются возможности для решения задач не только в области машинного и глубокого обучения, но и для удобной организации вычислений и научной визуализации. Экосистема позволяет разрабатывать и реализовывать программные модули на языке Python, а также проводить методические расчеты.

► Исследование динамики намагниченности в джозефсоновском  $\varphi_0$ -переходе [202]. Методика разработки программных модулей, позволяющих не только проводить расчеты, но и визуализировать результаты исследования и сопровождать их необходимыми формулами и пояснениями (см. рисунок ниже).

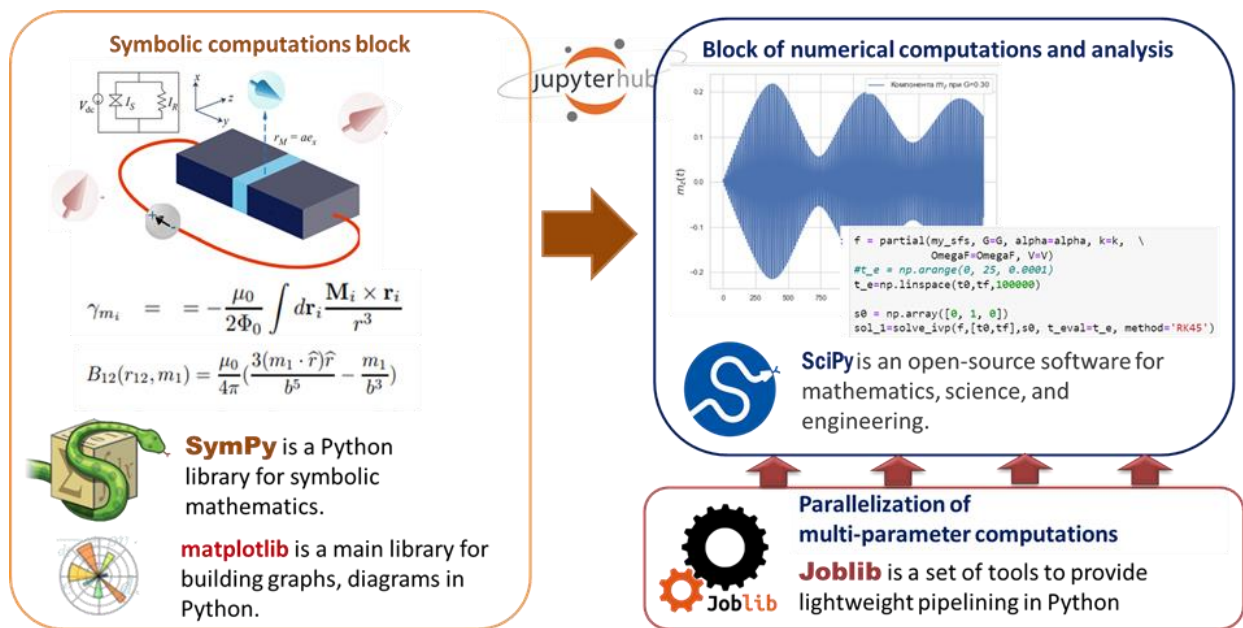


Схема программных модулей для исследования систем с джозефсоновскими переходами.

### 3.2.2. Решения для экспериментов ОИЯИ на базе машинного обучения

Подведен итог работы, проделанной под руководством проф. Г.А. Ососкова, о возможностях использования методов на основе машинного обучения для получения решений в экспериментах ОИЯИ.

#### ► Машинное обучение на высокопроизводительных вычислительных инфраструктурах в ОИЯИ

- **Реконструкция событий в детекторах GEM.** Активно разрабатываются и тестируются новые эффективные методы отслеживания на основе графовой нейронной сети (GNN) для детектора GEM установки BM@N в NICA. Этот подход хорошо адаптирован для решения известной проблемы ложных хитов, присущей полосовым детекторам, таким как GEM, с помощью алгоритмов минимального дерева ветвления [203].

- **Использование глубокого нейронного трекинга для решения проблемы кризиса отслеживания в детекторных средах, таких как HL-LHC Run-4 и MPD-NICA.**

В течение 2020 года ранее созданная программа трекинга TrackNETv2 посредством однократного обучения была модифицирована для работы с данными цилиндрического трекера GEM (CGEM) дрейфовой камеры BESIII с дальнейшим развитием этой программы для применения к более сложным данным детектора MPD на коллайдере NICA [204].

В течение 2021 года были продолжены исследования по разработке быстрых программ параллельного действия на основе глубоких нейронных сетей для реконструкции треков элементарных частиц при обработке экспериментальной информации от детекторов с фиксированной целью (эксперимент BM@N) и эксперименты на коллайдерах (BESIII в ИФВЭ в Пекине и SPD на коллайдере ОИЯИ NICA). В ходе исследований были доработаны программа локального трекинга TrackNETv2 и две программы глобального трекинга RDGraphNet и LOOT, что позволило с приемлемой точностью выполнить исследование трекинга за внутренним цилиндрическим детектором CGEM коллайдерного эксперимента BES-III. Результаты были опубликованы в виде докладов конференции [205–207].

В течение 2022 года был разработан подход к трекингу частиц на основе глубоких нейронных сетей для эксперимента BM@N и будущего эксперимента SPD [208].

Представлены пересмотренные алгоритмы – комбинация рекуррентной нейронной сети (RNN) и графовой нейронной сети (GNN) для данных моделирования BM@N RUN 7 Монте-Карло и GNN для предварительных данных моделирования SPD Монте-Карло.

- **Обнаружение болезней на листьях растений методом глубокого обучения [209]**

Специальная база данных виноградных листьев, состоящая из здоровых и больных виноградных листьев, была дополнительно расширена, и была разработана специальная модель классификации, основанная на глубокой сиамской сети (deep Siamese network) с последующим классификатором k ближайших соседей (k-Nearest Neighbors – KNN). Реализация новой архитектуры с глубокой сиамской сетью в качестве экстрактора признаков и однослойным перцептроном в качестве классификатора приводит к значительному увеличению точности, до 96%. Использование глубокой сиамской нейронной сети в качестве экстрактора признаков позволяет достичь 99% точности распознавания на тестовом подмножестве изображений

- **Однократное обучение с потерей триплетов для задач классификации растительности [210].** Функция потери триплетов была успешно использована для значительного повышения точности однократных задач обучения, связанных с растительностью. Первая задача – обнаружение болезней растений на 25 классах пяти культур (виноград, хлопчатник, пшеница, огурцы и кукуруза). Вторая задача – определение видов мхов (5 классов). В обеих задачах мы использовали самостоятельно собранные базы данных изображений. Наша сиамская сетевая архитектура с тройной функцией потерь и MobileNetV2 в качестве базовой сети показала самые впечатляющие результаты в обеих вышеупомянутых задачах, с показателем успеха более 97,8 % средней точности для обнаружения болезней растений и 97,6 % для классификации видов мхов.

- **Продолжены совместные исследования с ФЛНФ в рамках международной программы UNECE ICP Vegetation по мониторингу и прогнозированию процессов загрязнения воздуха в Европе и Азии** с внедрением данных дистанционного зондирования Земли совместно с методами машинного обучения для прогнозирования загрязнения воздуха тяжелыми металлами. Средняя точность моделей превысила 89%. Построены модели загрязнения алюминием, железом и сурьмой в центральном регионе России [211].

- **Использование методов машинного обучения для анализа продуктов ядерных реакций [212]**

В исследованиях, проведенных совместно с ЛЯР ОИЯИ в рамках проекта по выявлению тонкой структуры в массовом и энергетическом распределениях продуктов ядерных реакций, успешно проведен нейросетевой анализ тонкой структуры в осколках спонтанного деления калифорния  $^{252}\text{Cf}(\text{sf})$ .

### **3.2.3. Другие решения на основе экосистемы ML/DL/HPC**

- ▶ **Использование генетического алгоритма (ГА): сравнение передовых методов оптимизации пути комплектации: пример двухзонного склада [213].** Сокращение расстояния при сборочном туре часто считается обязательным фактором повышения эффективности работы склада. В этой статье основное внимание уделяется производительности метода ГА и его сравнению с другими стратегиями маршрутизации, такими как эвристика, опытный сборщик товаров на складе и алгоритм грубой силы при заданных предположениях. Набор симуляций и расчетов основан на примере промышленного случая. Результаты исследованных стратегий маршрутизации при заданных допущениях (двухзонный склад среднего размера, размер заказа – 15 позиций и т. д.) показывают доминирование алгоритма грубой силы по сравнению с опытным сборщиком,

ГА и простой эвристикой. Это также указывает на то, что ГА – это метод оптимизации, который требует модификации для решения задач оптимизации пути выбора и при заданных предположениях может генерировать лучшие решения, чем простые эвристики, и сравнимые с опытным сборщиком. Результаты также показывают довольно значительную чувствительность результатов ГА к используемому оператору отбора, размеру популяции и количеству поколений.

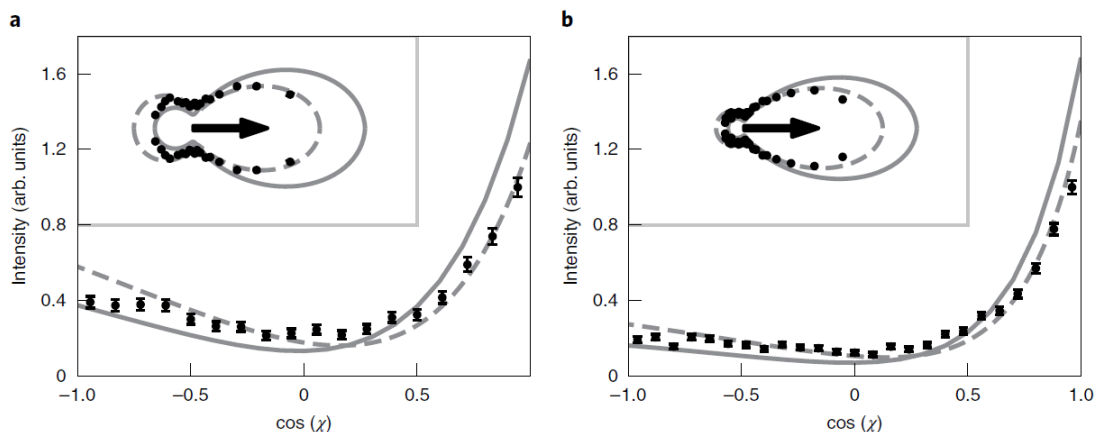
► **Прогнозное моделирование центров хранения и обработки данных**

• **Вероятностный подход к моделированию центров обработки данных VM@N**

Это междисциплинарная работа, целью которой является определение аппаратной конфигурации, обеспечивающей работоспособность системы хранения и обработки данных с минимальными ресурсами. Представлены результаты для программной поддержки детектора VM@N [214,215].

**3.3. Реализация эффективных численных методов для трудно решаемых задач на платформах HybriLIT/GOVORUN**

► **Кинематически полное экспериментальное исследование комптоновского рассеяния на атомах гелия вблизи порога [216].** В этом исследовании, опубликованном в журнале Nature Physics, сообщается о высокоточных экспериментах по комптоновскому рассеянию на свободных атомах с помощью импульсной спектроскопии ионов отдачи с холодной мишенью (COLTRIMS), посвященных интригующему низкоэнергетическому околопороговому режиму, в котором классическая теория эффекта Комптона перестает быть применимой. Получение кинематически полного набора данных об ионизации за счет комптоновского рассеяния атомов – в отличие от обнаружения только испущенного электрона или рассеянного фотона – обеспечивает важный ключ к чувствительной проверке теорий, а также позволяет проводить чистую физическую интерпретацию результатов. Расчеты проводились на суперкомпьютере «Говорун» ОИЯИ.



Полностью дифференциальные угловые распределения электронов. Угол рассеяния фотонов  $130 < \vartheta < 170^\circ$ . Показан косинус угла  $\chi$  между вылетающим электроном и переданным импульсом  $Q$  для энергий электронов  $1.0 < E_e < 3.5$  eV (a) and  $3.5 < E_e < 8.5$  eV (b). На вставках показаны те же данные в полярном представлении, где стрелка указывает направление передачи импульса. Черные точки – экспериментальные данные. Столбики погрешностей представляют собой стандартную статистическую ошибку. Сплошная и пунктирная линии представляют собой теоретические кривые, полученные в соответствии с подходом I и подходом II, соответственно. Теоретические кривые нормализуются таким образом, чтобы получить один и тот же интеграл эксперимента и теории.

• **Комптоновская ионизация атома водорода фотонами вблизи порога в диапазоне энергий несколько кэВ: нерелятивистский подход [217].** Обсуждается теория, направленная на описание результатов уникальных экспериментов по измерению полностью дифференциальных сечений комптоновской однократной ионизации атома гелия вблизи порога ионизации при энергии фотонов в несколько кэВ. Сечения ионизации реакции ( $\gamma$ ;  $\gamma e$ ) на атоме водорода получены в силу теоретической простоты модели. Особое внимание уделено исследованию кинематической области реакции вблизи порога, где ожидается получение ценной информации о начальном и конечном состояниях мишени. Расчеты проводились на гетерогенной вычислительной платформе HybriLIT МИВК ОИЯИ с использованием СК «Говорун».

► **Комптоновская ионизация атомов как метод динамической спектроскопии [218].**

В [216] показана возможность измерения полностью дифференциального сечения реакции однократной комптоновской ионизации атома гелия без регистрации рассеянного фотона. В продолжение данной работы подробно исследуется использование таких реакций для изучения импульсного распределения активного электрона в атомах мишени и проводится сравнение метода комптоновской импульсной спектроскопии с известной электронной импульсной спектроскопией.

► **Потенциальные корни явления глубокого подбарьерного синтеза тяжелых ионов.**

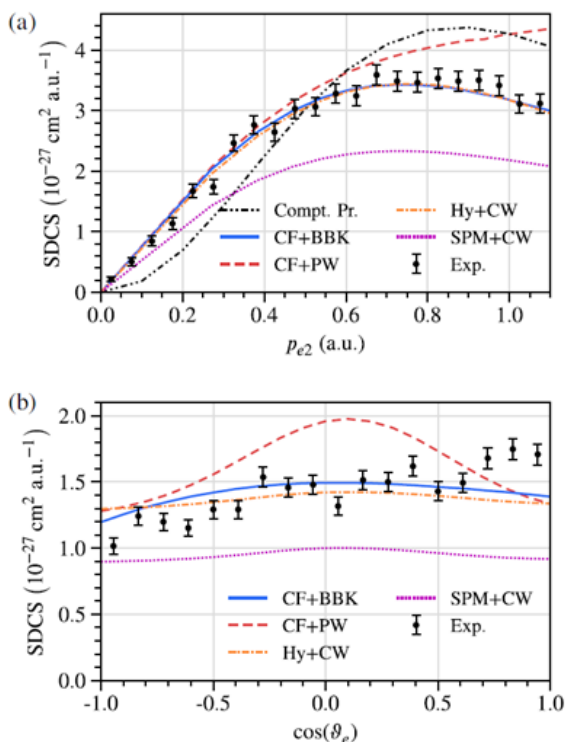
Анализ происхождения неожиданного глубокого подбарьерного затруднения синтеза тяжелых ионов в реакциях  $^{64}\text{Ni} + ^{100}\text{Mo}$ ,  $^{64}\text{Ni} + ^{64}\text{Ni}$  и  $^{28}\text{Si} + ^{64}\text{Ni}$  выполнен на основе усовершенствованного подхода связанных каналов, реализованного с помощью метода конечных элементов. С помощью потенциала Вудса–Саксона экспериментальные сечения и S-факторы этих реакций удивительно хорошо воспроизводятся в рамках метода внезапного приближения. Установлено, что учет недиагональных элементов матрицы связи, не учитываемый в традиционных подходах метода связанных каналов при задании граничных условий внутри потенциального кармана и его минимального значения, играет решающую роль для вывода численных результатов согласующихся с экспериментальными данными. Достигнуто хорошее согласие с общей тенденцией экспериментальных данных для S-фактора реакции слияния  $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ , не имеющей ярко выраженного максимума для этой системы [219].

► **Точные расчеты дираковских электронов в двухцентровом кулоновском поле: приложение к тяжелым ионам.** Релятивистские энергии основного состояния двухцентровых задач для уравнения Дирака рассчитаны с точностью до 8–9 знаков при межъядерном расстоянии  $2/Z$  (а.е.) до  $Z = 121$ . Возникновение ложных состояний в решении уравнение Дирака для задачи Кулона устраняется с помощью минимаксной формулировки, использующей независимые нелинейные параметры в большой и малой компонентах базисных функций. На сегодняшний день написана тестовая версия программы поиска решения задачи о безусловном непрерывном минимаксе [220].

► **Создание нового метода динамической спектроскопии,** дополняющего известные методы, такие как  $(e, 2e)$  и  $(e, 3e)$  спектроскопия. Возможность использования двойной ионизации атома гелия комптоновским рассеянием в качестве инструмента для прямой спектроскопии электрон-электронных корреляций оказалась ценным исследовательским инструментом [221]. Это потребовало разработки нерелятивистского теоретического описания процесса в рамках приближения Крамерса–Гейзенберга–Валлера, которое было реализовано с высокой вычислительной эффективностью для достаточно высоких энергий

фотонов в несколько десятков кэВ. Эти разработки заложили основу для нового метода комптоновского рассеяния, обсуждаемого в следующем исследовании [222].

► **Импульсные распределения ионов и электронов при однократной и двукратной ионизации гелия, индуцированной комптоновским рассеянием фотонов с  $h\nu = 40$  кэВ [222].** Установлено, что импульсное распределение двухзарядного иона очень близко к комптоновскому профилю ядра в основном состоянии атома гелия, а импульсное распределение однозарядного иона дает точное изображение комптоновского профиля электрона. Чтобы воспроизвести эти результаты, нерелятивистские расчеты требуют использования сильно коррелированных волновых функций начального и конечного состояний.



Двойная ионизация комптоновским рассеянием фотонов при  $h\nu = 40$  кэВ. Соответственно, показаны единичные дифференциальные сечения для импульсов электронов (a) и угла эмиссии  $\vartheta_e$  между направлением пучка электронов и падающего фотона (b). Данные интегрированы по 0,1–1,1 а.е. импульса электрона и нормированы на интеграл сплошной синей линии и различаются на каждой панели соответственно. Столбики погрешностей представляют собой стандартную статистическую ошибку. Цветные линии – это расчеты с использованием разных начальных и конечных состояний. Штрихпунктирная черная линия – импульсное распределение связанного электрона [222].

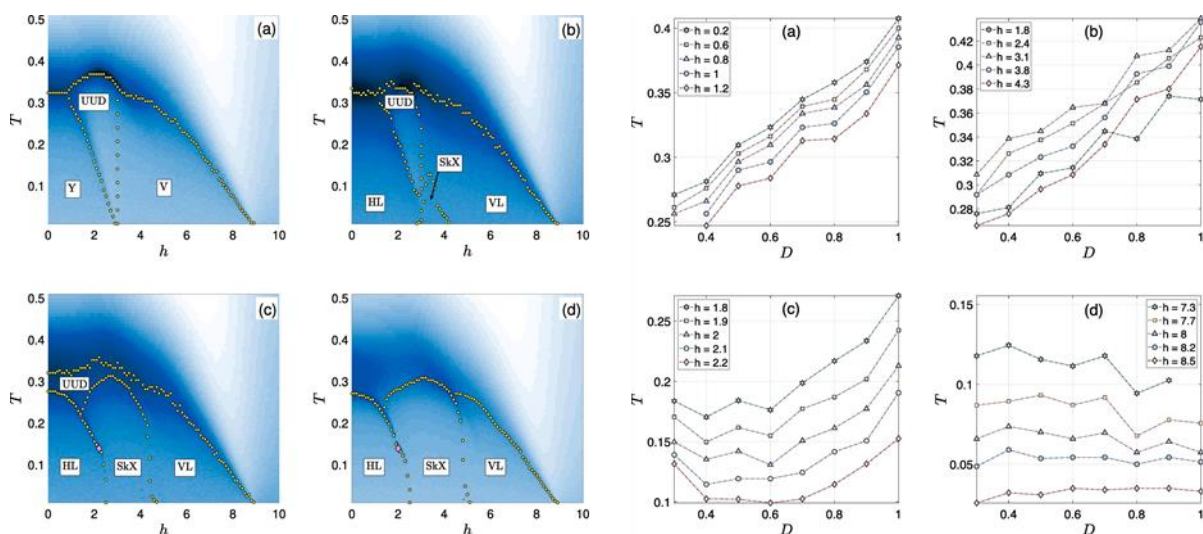
► **Разработка новых специализированных алгоритмов и программного обеспечения** сыграла важную роль в успехе этих исследований.

- **KANTBP 3.1: программа FORTRAN, включенная в библиотеку CPC Library [223].** Программа вычисляет значения энергии, матрицы отражения и прохождения и соответствующие волновые функции в приближении связанных каналов адиабатического подхода. Представлены эталонные расчеты сечений слияния реакций  $^{36}\text{S} + ^{48}\text{Ca}$ ,  $^{64}\text{Ni} + ^{100}\text{Mo}$ . В качестве теста программа применяется для расчета матриц отражения и прохождения и соответствующих волновых функций точно решаемой модели волновода, а также сечений слияния и средних угловых моментов реакции  $^{16}\text{O} + ^{144}\text{Sm}$ .

- **Полностью симметричные квадратурные правила с положительными весами и с узлами, лежащими внутри 3, ..., 6-мерного симплекса** (так называемый PI-тип) [224]. Представлены полностью симметричные квадратурные правила типа PI до 20-го порядка по тетраэдру, 16-го порядка по 4-симплексу, 10-го порядка по 5- и 6-симплексам. Соответствующие программы реализованы комбинацией языков программирования MAPLE и FORTRAN.

- **INQSIM – программа преобразования полностью симметричных квадратурных правил типа PI на 2-, ..., 6-симплексах из компактного вида в развернутый** (5-е мая 2022 г.) [225].

► Изучено образование и рост фазы кристалла скирмиона (SkX) в фрустрированном гейзенберговском антиферромагнетике на треугольной решетке с взаимодействием Дзялошинского-Мория в присутствии внешнего магнитного поля [226]. Построены фазовые диаграммы в плоскости параметров температурного поля с фазовыми переходами первого рода и трикритическими точками и изучена их эволюция с ростом напряженности ДМИ. Обнаружено, что уже относительно небольшая интенсивность ДМИ может привести к появлению фазы SkX при низких температурах вблизи точки встречи остальных спиральных, копланарных вверх-вверх-вниз и наклонных V-образных упорядоченных фаз. С помощью алгоритма Монте-Карло с параллельной закалкой (Parallel Tempering – PT) установлено, что минимальное значение ДМИ, при котором появляется скирмионная фаза,  $D_t \approx 0,02$ , на порядок меньше, чем сообщалось ранее. Найдены достоверные и точные положения фазовых границ между разными фазами. Часть расчетов выполнена на гетерогенной вычислительной платформе HybriLIT. Пример полученных результатов показан ниже.



Слева: эволюция топологии фазовой диаграммы в плоскости  $T-h$  для  $L=48$  и меньших значений  $D$ : (a)  $D=0$ , (b)  $D=0,1$ , (c)  $D=0,2$  и (d)  $D=0,3$ ; Справа: температуры перехода в зависимости от параметра ДМИ  $D$  для выбранных значений поля при фазовых переходах (a) P-HL, (b) P-SkX, (c) HL-SkX и (d) P-VL.

► Параллельные реализации пакетов для расчета ядерно-ядерного оптического потенциала в рамках модели двойной свертки

- Использование MPI и OpenMP при разработке пакета [227]. Тестовые расчеты полного сечения рассеяния  ${}^6\text{He} + {}^{28}\text{Si}$  при энергии 50 А МэВ показывают, что обе методики обеспечивают значительное сопоставимое ускорение вычислений.

- Использование пакета OpenMP для ускорения расчета матричных элементов индуцированного дибарионами потенциала трехчастичной силы в легких ядрах с  $A = 6$  в рамках кластерной модели  $a + 2N$  [228]. Кратко описана теоретическая основа. Представлены и обсуждены результаты тестовых расчетов на платформе HybriLIT МИВК с увеличением числа параллельных потоков.

► Пакеты программного обеспечения для HPC, реализованные в библиотеках для вычислений общего назначения.

Новое поступление важного параллельного пакета HPC в библиотеку программ JINRLIB:

- Split – параллельная реализация численного решения системы алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей с использованием алгоритма разбиений и технологии MPI (27-е апреля 2020 г.) [229].

- **RK4-MPI** – параллельная реализация численного решения задачи Коши методом Рунге–Кутты 4-го порядка с использованием технологии MPI (23-е марта 2021 г.) [230].

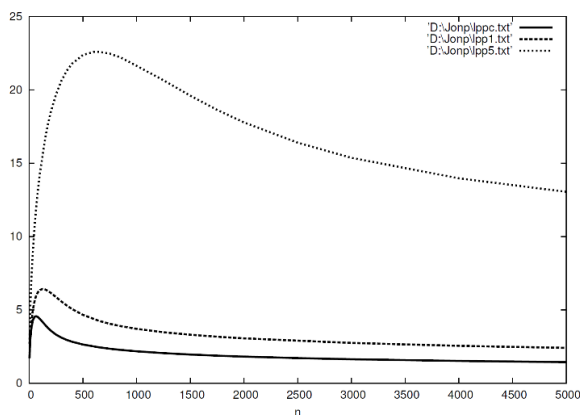
► **Высокопроизводительные расчеты физических наблюдаемых в спинтронике** [231,232]. Исследована модель  $\varphi_0$ -перехода Джозефсона в системе «сверхпроводник–ферромагнетик–сверхпроводник». Для численного моделирования в широком диапазоне параметров, требующего значительного машинного времени, был разработан и реализован на кластере HybriLIT и суперкомпьютере «Говорун» параллельный компьютерный код MPI/C++.

- Периодическая структура доменов перемагничивания исследуется в рамках модели  $\varphi_0$ -перехода сверхпроводник-ферромагнетит-сверхпроводник. Были разработаны две версии параллельной реализации на основе технологий MPI и OpenMP. Работоспособность обеих версий подтверждена тестовыми расчетами на платформе HybriLIT [233,234].

► **Оценка роста ошибки округления в стопках длинных джозефсоновских переходов**

- **Анализ ошибок округления** в обычных численных расчетах вольтамперных характеристик (IVC) джозефсоновских контактов показывает, что ошибки округления могут выйти из-под контроля. Предлагается новая схема вычислений вместе с теоретическими результатами, гарантирующими их ограниченность [235]. Практические эксперименты на суперкомпьютере «Говорун» подтверждают теоретические результаты.

- **Оценка роста ошибки округлений выполнена в метрике  $l_2$**  [236].



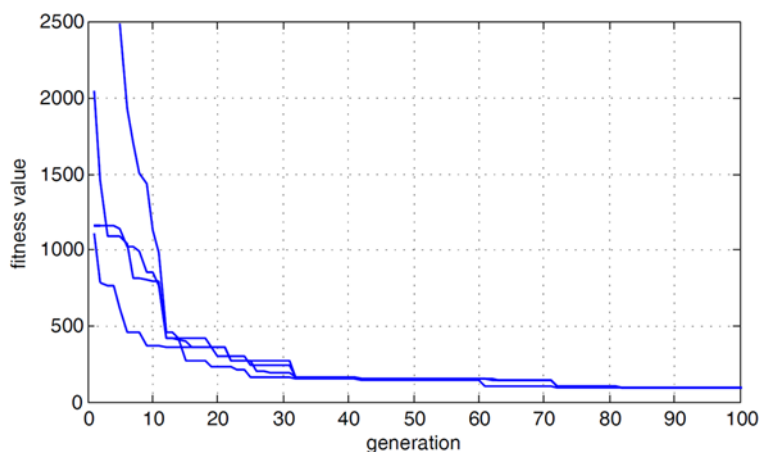
На рисунке представлены графики роста единичной ошибки метрики  $l_2$ ,  $t \leq 5000$ , для различных  $\tau$  и  $h$ . Нижний график для случая  $\tau = h = 0,1$ . Средний график для случая  $\tau = h = 0,05$ , а верхний график для  $h = 0,05$  и  $\tau = h/5$ . Сравнивая эти графики, мы видим, что быстрее всего ошибки округления растут в случае  $\tau/h = 1/5$ . Отсюда следует практический совет использовать тот же шаг сетки,  $\tau = h$ .

- **Оценка роста ошибки округлений выполнена для задач Коши в равномерной метрике  $l_1$**  [237]. Тщательно исследуются конкретные задачи Коши, в том числе расчеты IVC для длинных джозефсоновских переходов. Теоретические результаты устанавливают ограниченность накоплений ошибок округления в равномерной метрике. Расчеты, выполненные на СК «Говорун» в ЛИТ с использованием системы REDUCE, позволяют провести эмпирическую проверку этих результатов.

► **Эффективная генетическая оптимизация кодов LDPC для улучшения исправления пакетных ошибок** [238]. Получены надежные границы возможностей коррекции для кодов различной длины и различной избыточности кодов LDPC (Low Density Parity Check). Результаты быстрых параллельных решений, запущенных на кластере HybriLIT и на



суперкомпьютере «Говорун», иллюстрируют возможности метода в различных вариантах работы.



Примеры оптимизационных задач. Код LDPC (128,72) был выбран для оптимизации. Проиллюстрирована сходимость наилучшего значения пригодности к оптимальному решению.

### 3.4. Достижения в аналитике больших данных

Идет разработка концепции и поэтапная реализация в рамках *подхода больших данных (Big Data)* масштабируемой *программно-аналитической платформы* для сбора, хранения, обработки, анализа, поиска актуальной информации и визуализации результатов для MPD, SPD и VM@N, экспериментов на ускорителе NICA и в рамках нейтринной программы ОИЯИ. Использование суперкомпьютерных технологий в сочетании с «озерами данных» (*Data Lakes*) и технологиями больших данных также открывает новые возможности для развития крупномасштабных мегасайенс исследовательских проектов. Дальнейшие разработки касаются методов и программного обеспечения для эффективного использования аналитики больших данных для ресурсоемких вычислений на сопроцессорах и графических процессорах (GPU) для моделирования, реконструкции и обработки экспериментальных данных (установки на ускорительном комплексе NICA, нейтринные экспериментальные программы ОИЯИ, эксперименты на LHC).

Особое внимание уделено новым перспективным направлениям создания распределенных хранилищ данных («озера данных»), интеграции больших данных и суперкомпьютерных технологий, методов «*машинного обучения*». В 2019 году был создан распределенный прототип «*озера научных данных*» на базе центров в Дубне, Москве и Гатчине. Используя прототип, кэш-система была протестирована с использованием как синтетических тестов, так и реальных экспериментов на LHC.

Разрабатываются методы анализа временных рядов с использованием *технологий больших данных* для интеллектуального мониторинга распределенных вычислительных систем, включая методы и *технологии машинного обучения и искусственного интеллекта* для оптимизации функционирования распределенных вычислений крупномасштабных физических экспериментов. Создан прототип *программно-аналитической платформы* для решения текущих и перспективных задач ОИЯИ с использованием интеллектуального анализа больших данных. В настоящее время на прототипе аналитической системы ведутся исследования характеристик и структуры трафика внешней сети ОИЯИ. Результаты этих исследований планируется использовать для создания системы интеллектуального мониторинга информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ, в том числе ее части, задействованной в распределенных международных вычислительных инфраструктурах. Использование методов, разработанных для распределенных систем, позволит предложить

новые решения по обеспечению безопасности вычислительных инфраструктур экспериментов.

В аналитике больших данных важную роль играет математическое и алгоритмическое обеспечение обработки информации. В рамках темы проводятся исследования и разработки таких методов, как динамическая квантовая кластеризация, локально чувствительное хеширование, математические методы организации цепочек вычислений и др. Результаты тестируются на созданном прототипе аналитической платформы.

Ведется разработка платформы для потоковой и пакетной обработки больших данных и ее тестирование на примере анализа сетевого трафика [239].

Методы интеллектуальной обработки текстов в социально-экономических приложениях предлагают широкий спектр приложений для аналитики больших данных [240]. Примером может служить создание автоматизированной системы сбора, обработки и анализа данных из открытых источников информации, направленной на выявление деятельности, связанной со сбором средств для финансирования экстремизма.

Разработанные подходы к созданию платформ аналитики больших данных успешно используются в образовательном процессе [241].

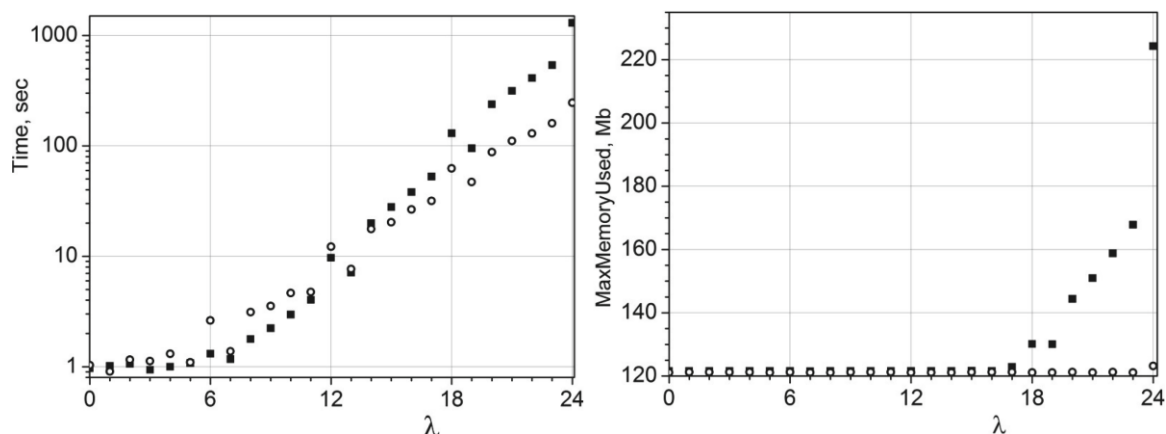
► **Решения Big Data** для автоматизированного мониторинга и анализа рынка труда в РФ выведены и внедрены в аналитическую платформу, реализующую полный цикл обработки данных, в результате чего получается внушительная база данных объемом 20 ТБ. Аналитическое ядро платформы построено на разработанных авторами методах и алгоритмах с использованием методов обработки естественного языка (Natural Language Processing – NLP), включая семантический анализ на основе моделей нейронных сетей, обученных на больших текстовых массивах [242].

#### 4. Методы, алгоритмы и программное обеспечение компьютерной алгебры и квантовых вычислений

► **Разработка символьно-численных алгоритмов решения систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных**

• Для алгоритмической проверки линеаризуемости нелинейных (обыкновенных) дифференциальных уравнений был использован, ранее разработанный авторами, метод треугольного разложения Томаса для полиномиальных нелинейных систем дифференциальных уравнений в частных производных [243].

• **Символьно-численный алгоритм вычисления ортонормированного базиса группы  $O(5) \times SU(1,1)$**  [244]. Разработан и реализован новый универсальный эффективный символьно-численный алгоритм в виде первой версии кода O5SU11 в системе Wolfram Mathematica для вычисления ортонормированного базиса коллективной модели Бора–Моттельсона, как в собственной, так и в лабораторной системах отсчета. Алгоритм может быть реализован в любой системе компьютерной алгебры. Такой базис широко используется для расчета спектров и электромагнитных переходов в физике твердого тела, молекулярной и ядерной физике.



Время CPU в с (слева) и максимальная память в Мб, используемая для хранения промежуточных данных для текущего сеанса Mathematica при вычислении интегралов перекрытия и матриц ортогонализации (справа). Оба значения даны в зависимости от параметра  $\lambda$  при  $L = \lambda$  в лабораторной (отмечены квадратами) и собственной (отмечены циклами) системах отсчета.

### ► Решения сложных задач компьютерной алгебры

- **Идентификация параметрического возникновения множественных устойчивых состояний для биологических сетей [245].** Рассмотрена задача анализа биологических сетей по определению областей в пространстве параметров, в которых существуют множественные стационарные состояния при положительных действительных значениях переменных и параметров. Сообщалось о нескольких подходах к решению проблемы с использованием инструментов пакета Symbolic Computation, а также о прогрессе в направлении полуалгебраических описаний мультистационарных областей пространства параметров. Изученные биологические сети представляют собой модели сети митоген-активируемых протеинкиназ (Mitogen-Activated Protein Kinases – MAPK), которая до сих пор потребовала значительных усилий, используя специальное понимание ее структуры соответствующих моделей.

- **Конструктивные модели описания конечных квантовых систем**

Доложен алгоритм разложения перестановочных представлений сплетений конечных групп на неприводимые компоненты. Реализация алгоритма на С способна строить неприводимые разложения представлений сплетений больших размерностей и рангов [246–249]. Конструктивный подход к квантовой механике был недавно проанализирован с точки зрения физики и космологии в работе Тома Бэнкса, *“Finite Deformations of Quantum Mechanics”*, arXiv:2001.07662[hep-th] (2020). Этот автор заключает, что квантовые модели, полученные в рамках этого подхода, *«могут охватывать конечномерные приближения ко всем известным моделям теоретической физики»*.

- **Методы вычисления интегралов Фейнмана [250].** С использованием разработанных ранее методов расчета интегралов Фейнмана определены аномальные размерности масс кварков в трехпетлевом приближении.

- **Ресурсы графического процессора для вычисления инволютивных базисов и базисов Грёбнера [251].** Разработано табличное представление полиномов для вычисления инволютивных базисов и базисов Грёбнера систем нелинейных полиномиальных уравнений. С помощью этого представления, реализованного на С++, показана и реализована возможность эффективного делегирования GPU некоторых частей этой вычислительной задачи. Это открывает новые возможности для решения сложных задач в этой области науки.

- **Слоения группы  $SL(n)$  и пространства  $sl^*(n)$**  [252]. Найдены параметры на классе сопряженности в группе Ли  $SL(n)$  и параметры на коприсоединенной орбите в пространстве  $sl^*(n)$ , двойственном к алгебре Ли. Таким образом были решены задачи тривиализации слоений группы  $SL(n)$  и пространства  $sl^*(n)$ .

► **Решения задач, связанных с квантовой информацией**

- **Динамическое моделирование квантовой запутанности в конечной квантовой механике** [253,254]. В рамках конструктивной квантовой механики обсуждается возникновение геометрии из запутанности в составных квантовых системах. Показано, что вторая энтропия запутанности Реньи может быть полезна при применении полиномиальной компьютерной алгебры для моделирования метрических структур в квантовых системах с геометрией.

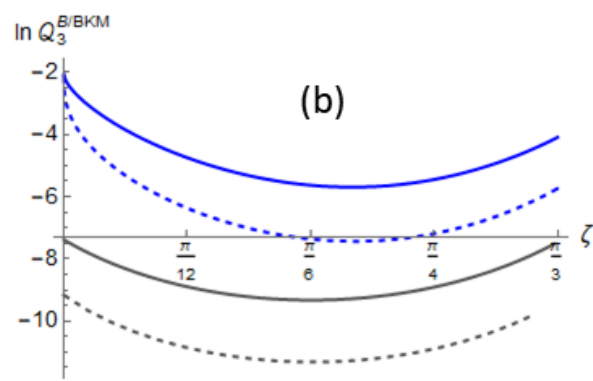
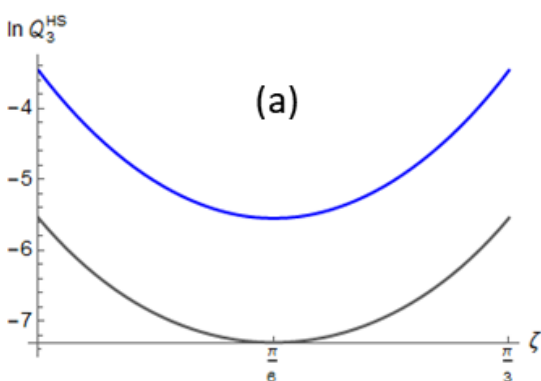
- **Индикатор классичности произвольной N-уровневой квантовой системы.**

Введен глобальный показатель для квантования соответствия «классичность-квантовость» [255,256], который определяется как относительный объем подпространства с положительной функцией Вигнера пространства состояний N-мерной квантовой системы. Изучена зависимость глобального индикатора классичности от геометрии пространства квантовых состояний для полного семейства представлений вигнеровских квазивероятностных распределений на примере ансамблей Гильберта–Шмидта, Буреша и Боголюбова–Кубо–Мори для кубитов и кутритов.

Используя свойство отрицательности функции Вигнера, введена глобальная мера неклассичности пространства состояний N-уровневой системы в распределении Гильберта–Шмидта. Получена численная оценка этой величины и доказано предложение, утверждающее ее точное значение в пределе для  $N \rightarrow \infty$  [257].

Продолжены исследования по анализу квантового информационного ресурса конечномерных квантовых систем с использованием метода квазираспределений в фазовом пространстве. Были введены меры квантовости, позволившие количественно описать отличие квантовых состояний от соответствующего классического аналога. На основании свойства отрицательности соответствующего вигнеровского квазираспределения был рассчитан показатель, характеризующий квантовость базовых систем, кубитов и кутритов для различных метрик (Гильберта–Шмидта, Буреша и Боголюбова–Кубо–Мори), заданный на пространстве квантовых состояний [258,259].

- Проанализирован  $Q_3$ -индикатор классичности квантовых состояний с различными симметриями трёхуровневой квантовой системы, определяемый как вероятность нахождения состояния с положительной функцией Вигнера в унитарно-инвариантном ансамбле случайных состояний, в метриках Гильберта–Шмидта, Буреша и Боголюбова–Кубо–Мори. В результате расчетов  $Q_3$ -индикаторов во всех метриках была выявлена закономерность: состояния с «большой» симметрией являются более классическими [260].



(a)  $Q_3$ -индикаторы для ансамбля Гильберта–Шмидта с симметриями  $(1)^3$  (серая кривая) и  $(2) \times U(1)$  (синяя кривая); (b)  $Q_3$ -индикаторы для ансамблей Буреша (сплошные кривые) и Боголюбова–Кубо–Мори (пунктирные кривые) с симметриями  $U(1)^3$  (серые кривые) и  $SU(2) \times U(1)$  (синие кривые) [260].

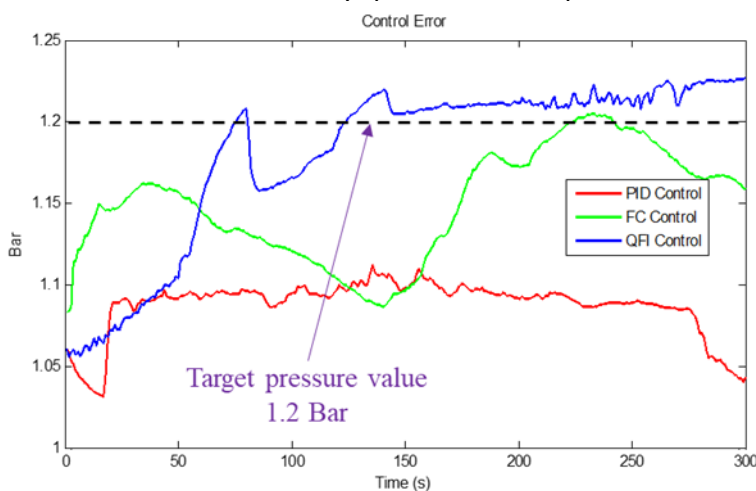
- **Надежность запутанности в каналах квантовой декогеренции.** Надежность запутанности в максимально запутанных смешанных состояниях двух кубитов (MEMS) была изучена в каналах квантовой декогеренции [261].

- ▶ **Неравновесные системы Бозе и квантовая обработка информации [262,263].** Дилемма Хоэнберга–Мартина, оценивающая несовместимость между возникновением бесщелевого состояния и выполнением законов сохранения, решается в рамках метода Хартри–Фока–Боголюбова [262]. Это позволяет провести новую классификацию неравновесных состояний для конденсированных систем Бозе. Численные расчеты дают результаты, хорошо согласующиеся с экспериментальными данными. Возможность использования конденсации Бозе–Эйнштейна для производства запутанности может быть применена для обработки квантовой информации [263].

- ▶ **Роль коллективной информации в сетях квантовых операционных агентов [264,265].** Развита теория интеллектуальных сетей взаимодействующих квантовых агентов. Численно изучена роль обмена информации между агентами в этих сетях. Такие исследования важны для разработок моделей искусственного интеллекта.

- ▶ **Квантовые алгоритмы на симуляторах, реализованных на суперкомпьютерах классической архитектуры,** мотивированы перспективами, которые они открывают в изучении химических свойств тяжелых элементов, для квантового глубокого машинного обучения, в робототехнике и других областях. С помощью комплектов для разработки программного обеспечения QuEST, Qiskit, CuQuantum и генератора квантовых схем Cirq были оценены текущие возможности СК «Говорун». Выяснилось, что размерность вектора состояния экспоненциально растет с увеличением числа кубитов, а возможности моделирования квантовых алгоритмов ограничены 38 кубитами на CPU, 31 кубитом на одном GPU и 34 кубитами на восьми GPU [266,267].

- ▶ **Задача управления давлением и расходом жидкого азота сверхпроводящих магнитов криогенной системы ускорительного комплекса NICA** решается, используя разработанную программно-аппаратную платформу на основе встраиваемых в контур управления квантовых нечетких регуляторов. Квантовый регулятор показал наиболее высокое быстродействие в достижении целевого значения, низкое перерегулирование и точность достижения цели управления в сравнении с остальными типами регуляторов.



Производительность и эффективность разработанной интеллектуальной системы дистанционного управления технологическим процессом охлаждения сверхпроводящего магнита обеспечили гарантированное достижение стабильной зоны сверхпроводимости,

с экономией расхода азота более чем на 50 % [268].

Управление процессом достижения заданного уровня давления азота разными типами регуляторов в режиме охлаждения (синяя кривая – квантовый регулятор, зеленая – нечеткий регулятор, красная – PID-регулятор)

Проектирование квантовых нечетких регуляторов основано на квантовых информационных технологиях и осуществляется с помощью разработанного сотрудниками ЛИТ программного инструментария QSCIT (Quantum Soft Computational Intelligence Toolkit) [269].

## ***Повышение научной компетентности в использовании компьютерных средств ОИЯИ***

Только образованные пользователи могут разобраться в сложной аппаратной инфраструктуре ОИЯИ. Обеспечение адекватного уровня компетентности в использовании вычислительных средств ОИЯИ является неременным условием успешного решения существующих научных задач на самом высоком уровне.

Понимание вычислительных средств самого высокого уровня аппаратной инфраструктуры МИВК (многофункционального информационно-вычислительного комплекса), реализованной в ЛИТ, требует резкого обучения новичка и постоянной заботы эксперта о развитии и расширении полученных знаний. С этой целью руководство ЛИТ, которое координировало эту деятельность с участием сотрудников ЛИТ по темам 1118 и 1119, внедрило и продвигало ***четкую и постоянную образовательную систему***.

Эта деятельность касалась как сотрудников ЛИТ, так и пользователей МИВК из ОИЯИ и стран-участниц ОИЯИ. Вкратце, эта система образования включала три этапа:

(а) ***Выделение ресурсов высокого уровня*** для этой цели. Полигон HybriLIT стал практическим центром обучения и роста молодых специалистов как ОИЯИ, так и стран-участниц ОИЯИ. Известные специалисты из ОИЯИ и институтов-партнеров в России и за рубежом часто читают лекции и обучают на полигоне HybriLIT. Помимо прямого доступа к вычислительным модулям HybriLIT, продвигаются новые формы онлайн-общения (например, Github), с целью обеспечения эффективных контактов на расстоянии и обратной связи.

В рамках сотрудничества с Государственным университетом «Дубна» студенты используют HybriLIT для двух целей: подготовки бакалаврских и магистерских диссертаций и решения задач в рамках проектов ОИЯИ.

В 2020 году дистанционно проведены мастер-классы для студентов из Чехии и Армении, проведены практические занятия на платформе HybriLIT для более 1 000 слушателей в рамках курсов: «Архитектура вычислительных систем», «Технологии высокопроизводительных вычислений», «Современные методы анализа сложных систем», «Машинное обучение и интеллектуальный анализ данных», «Языки и технологии анализа данных», «Математический аппарат и средства анализа данных» – с использованием экосистемы ML/DL/HPC, которая позволяет обучающимся освоить современные технологии разработки параллельных алгоритмов на новых вычислительных гибридных архитектурах и инструменты (библиотеки и фреймворки) для задач машинного и глубокого обучения.

В 2021 году на платформе HybriLIT проводились обучающие курсы и практические занятия по темам «Высокопроизводительные вычисления и суперкомпьютерные технологии» и «Машинное обучение и интеллектуальный анализ данных». На учебно-испытательном полигоне зарегистрировано 780 студентов Государственного университета

«Дубна» и более 300 студентов и аспирантов других вузов и стран-участниц ОИЯИ. В 2021 году с использованием ресурсов платформы HybriLIT подготовлено девять магистерских и бакалаврских диссертаций.

В 2022 году ресурсы платформы HybriLIT активно использовались в образовательных целях. Это направление связано как с учебными курсами для сотрудников ОИЯИ, так и с практическими занятиями для студентов Государственного университета «Дубна», Тверского государственного университета и др.

В 2022 году для более чем 800 студентов проведены практические занятия по курсам «Архитектуры вычислительных систем», «Технологии высокопроизводительных вычислений», «Современные методы анализа сложных систем», «Машинное обучение и интеллектуальный анализ данных», «Языки и технологии анализа данных», «Математический аппарат и инструментарий анализа данных» с задействованием ресурсов учебно-тестового полигона и экосистемы для ML/DL/HPC, позволяя студентам осваивать самые современные технологии разработки параллельных алгоритмов на новейших вычислительных гибридных архитектурах и инструментарий (библиотеки и фреймворки) для задач машинного и глубокого обучения.

**(б) Стимулирование заинтересованности молодежи** (студентов и сотрудников ОИЯИ) в получении **квалификационных степеней на основе упорного труда** (бакалавр, магистр, кандидат, доктор) в области научных вычислений.

Многоуровневый подход к квалифицированному образованию был обеспечен и продвигался благодаря индивидуальным усилиям, которые поощрялись руководством ЛИТ.

В рамках этой работы связи с высшими учебными заведениями (ГУ «Дубна», РЭУ, РУДН, ТвГУ и др.) позволили непосредственно участвовать в учебном процессе, курировать подготовку бакалавров и магистров.

В этой связи стоит упомянуть тщательную подготовку учебника по параллельному программированию [270]. Это полезно как студентам ГУ «Дубна», так и всем ученым, заинтересованным в повышении своих знаний в этой непростой, но необходимой области исследований.

Участие в качестве лекторов в циклах INTEREST (INTERnational REmote Student Training at JINR), организуемых Учебно-научным центром ОИЯИ на конкурсной основе для молодежи со всего мира, способствует повышению интереса к ОИЯИ как международному учреждению.

Помимо этого, существование в ЛИТ Диссертационного совета по присвоению ученых званий кандидатов и докторов наук, поддерживает живой интерес молодых сотрудников Темы 1119 к признанию выдающейся ценности их научных результатов.

За 2020–2022 годы трое молодых людей из состава Темы 1119 прошли все ступени к защите кандидатских диссертаций:

1. Александр Айриян (2020), тема диссертации: «Численное моделирование тепловых процессов в ячейках для молекулярной инъекции в источник ионов».

2. Андрей Сапожников (2020), тема диссертации: «Моделирование магнитных систем методом объемных интегральных уравнений с кусочно-линейной аппроксимацией поля внутри ферромагнетика».

3. Алина Волохова (2022), тема диссертации: «Численное исследование наблюдаемых, описывающих динамические характеристики в модели гидратированных электронов и фильтрации газоконденсатных смесей».

**(в) Периодическая организация специализированных мероприятий** (школ, курсов, конференций и т. д.) с лучшими доступными лекторами.

В 2021 г. в Северо-Осетинском государственном университете прошло рабочее совещание «Распределенные вычисления и наука о данных», в рамках которого студенты

прослушали учебный курс «Распределенные вычисления, машинное и глубокое обучение для решения прикладных задач», а также состоялась 3-я ИТ-Школа молодых ученых «Современные ИТ-технологии для решения научных задач», в которой приняли участие более 60 студентов и преподавателей университетов Юга России (Северная Осетия, Кабардино-Балкария, Чечня) и Юго-Осетинского государственного университета им. А.А. Тибилова. Были прочитаны лекции о научных проектах ОИЯИ, о развиваемых в ОИЯИ информационных технологиях и решениях для научных задач, проведены мастер-классы и учебные курсы по распределенным вычислениям, виртуализации и облачным технологиям, алгоритмам машинного и глубокого обучения для анализа сложно-структурированных данных.

Международная ИТ-школа «Аналитика больших данных» совместная инициатива Объединенного института ядерных исследований и Государственным университетом «Дубна» [271]. Школы проводились в 2019, 2020, 2021 гг. Сводку прошедших мероприятий можно посмотреть на сайте ОИЯИ

<http://www.jinr.ru/posts/mezhdunarodnaya-it-shkola-analitika-bolshih-dannyh-gotovit-kadry-dlya-megasajens-proektov/>

или на youtube:

<https://www.youtube.com/watch?v=5LJ87lkqeoс> и нажать ОТКРЫТЬ YOUTUBE.

Первая «Осенняя школа ОИЯИ по информационным технологиям», проходила с 14 по 19 ноября 2022 г. в ЛИТ. Участники школы ознакомились с программой ОИЯИ, прослушали учебные курсы по актуальным вопросам в области распределенных и высокопроизводительных вычислений, машинного обучения и искусственного интеллекта, математического моделирования, современных методов и технологий обработки и анализа данных, и получили возможность выбрать темы для выпускных работ. В школе приняли участие 60 студентов старших курсов из 13 российских вузов, в том числе вузов, в которых действуют информационные центры ОИЯИ. Десять лекций были прочитаны сотрудниками Темы 1119; из них девять доступны на сайте школы [272].

## Список литературы

[1] The 52-nd Meeting of CMP-PAC, 2 July 2020: <https://indico.jinr.ru/event/1328/>

Подробнее: **05. Adam**

• [https://indico.jinr.ru/event/1328/attachments/7214/10109/Extended\\_annotation.pdf](https://indico.jinr.ru/event/1328/attachments/7214/10109/Extended_annotation.pdf) (5 pp)

• [https://indico.jinr.ru/event/1328/attachments/7214/10511/2020\\_Written\\_Report\\_at\\_52nd\\_CMP\\_PAC\\_Theme1119.pdf](https://indico.jinr.ru/event/1328/attachments/7214/10511/2020_Written_Report_at_52nd_CMP_PAC_Theme1119.pdf) (43 pp.)

[2] V.P.Gerdт (21.01.1947–05.01.2021) <http://www.jinr.ru/posts/lit-jinr-directorate-deeply-regrets-to-announce/> (05.01.2021);

В.П. Гердт (21.01.1947–05.01.2021) <http://www.jinr.ru/posts/direktsiya-lit-s-glubokim-priskorbiem-izveshhaet/>

[3] 52\_PAC\_CMP\_Recommendations\_eng.pdf (6 pp.)

[4] 52\_PAC\_CMP\_Recommendations\_rus.pdf (7 pp.)

[5] P. Akishin, *The CBM RICH magnetic shielding box modelling*, Report at the 36th CBM Collaboration meeting (Oct. 19–23, 2020).



[6] P. Akishin, *The CBM RICH magnetic shielding box shape optimization*, Report at the 37th CBM Collaboration meeting (Darmstadt, March 1–5, 2021).

[7] P.G. Akishin, V.P. Ladygyn, *Optimization of the Ring Imaging Cherenkov Photodetector Shielding Box for Compressed Baryonic Matter Experiment*, Phys. Part. Nucl. Lett. **19**, 6, 785–788 (2022), *Оптимизация экранирующей коробки фотоприемника черенковского счетчика с кольцевым отображением для эксперимента по сжатому барионному веществу*, Письма в ЭЧАЯ **19**, 6(245), 627 (2022).

[8] I.V. Amirkhanov, I.N. Kiyani, J. Sulikowski, *Automated Control System for Smith–Garren Curves Measurement*, Phys. Part. Nuclei Lett. **17**, 57–64 (2020), <https://doi.org/10.1134/S1547477120010033>

[9] I.V. Amirkhanov, I.N. Kiyani, **PROGRAM LIBRARY JINRLIB EORP 2020 – Equilibrium Orbit Research Program**, April 06, 2020, <http://wwwinfo.iinr.ru/programs/jinrlib/eorp/index.html> (in Russian) <http://wwwinfo.iinr.ru/programs/jinrlib/eorp/indexe.html> (in English)

[10] A. Chervyakov, *Finite-element modelling of magnetic fields for superconducting magnets with magnetic vector and total scalar potentials using COMSOL Multiphysics®*, Int. J. Engineering Systems Modelling and Simulation **13**, 2, 117–133 (2022).

[11] O. Karamyshev, T. Karamysheva, I. Lyapin, V. Malinin, D. Popov, *CORD (Closed ORbit Dynamics): A new field map evaluation tool for cyclotron particle dynamics*, Physics of Particles and Nuclei Letters **18**, 4, 481–487 (2021), <https://doi.org/10.1134/S1547477121040117>, О. Карамышев, Т. Карамышева, И. Ляпин, В. Малинин, Д. Попов, *CORD (Closed ORbit Dynamics): программа для анализа карт магнитного и ускоряющего полей в расчетах динамики пучка циклотрона*, Письма в ЭЧАЯ **18**, 4(236), 393 (2021), [http://www1.iinr.ru/Pepan\\_letters/panl\\_2021\\_4/12\\_Karamyshev\\_ann.pdf](http://www1.iinr.ru/Pepan_letters/panl_2021_4/12_Karamyshev_ann.pdf)

[12] D. Blaschke, A. Friesen, Yu. Kalinovsky, A. Radzhabov, *Using the Beth–Uhlenbeck Approach to Describe the Kaon to Pion Ratio in a 2 + 1 Flavor PNJL Model*, Particles **3**, 1, 169–177 (2020), <https://doi.org/10.3390/particles3010014>

[13] A.V. Friesen, Yu.L. Kalinovsky, V.D. Toneev, *The role of the chiral phase transition in modelling the kaon to pion ratio*, JETP Letters **111**, 3, 147–148 (2020), arXiv: 1912.00722, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 3, 147–148 (2020).

[14] Yu.L. Kalinovsky, A.V. Friesen, E.D. Rogozhina, L.I. Golyatkina, *Application of a computer algebra systems to the calculation of the  $\pi\pi$ -scattering amplitude*, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **28**, 3, 216–229 (2020).

[15] D. Blaschke, A. Friesen, Yu. Kalinovsky, A. Radzhabov, *Chiral phase transition and kaon-to-pion ratios in the entanglement SU(3) PNJL model*, Eur. Phys. J. Special Topics **229**, 3517–3536 (2020), <https://doi.org/10.1140/epjst/e2020-000218-1>

[16] D. Blaschke, A.V. Friesen, Yu. Ivanov, Yu.L. Kalinovsky, M. Kozhevnikova, S. Liebing, A. Radzhabov, G. Roepke, *QCD Phase Diagram at NICA energies:  $K^+/\pi^+$  horn effect and light clusters in THESEUS*, Acta Phys. Polonica B, Proc. Suppl. **14**, 3, 485–489 (2021), [https://indico.cern.ch/event/802303/papers/3601725/files/9750-Blaschke\\_NICA-days2019.pdf](https://indico.cern.ch/event/802303/papers/3601725/files/9750-Blaschke_NICA-days2019.pdf) <https://arxiv.org/abs/2004.01159>

[17] A.V. Friesen, D. Goderidze, Yu.L. Kalinovsky, *Optimization of Monte Carlo Integration for Estimating the Pion Damping Width*, PEPAN Letters **19**, 4, 412–421 (2022), А.В. Фризен, Д. Годеридзе, Ю.Л. Калиновский, *Оптимизация вычисления интегралов методом Монте-Карло в применении к оценке ширины распада пиона*, Письма в ЭЧАЯ **19**, 4(243), 337 (2022).

[18] D. Blaschke, A. Friesen, Yu. Kalinovsky, A. Radzhabov, *Mott Dissociation and Kaon to Pion Ratio in the EPNJL Model*, Phys. Part. Nucl. **52**, 4, 609–614 (2021), <https://link.springer.com/article/10.1134/S1063779621040146>

Д. Блашке, А.В. Фризен, Ю.Л. Калиновский, А.Е. Раджабов *Диссоциация Мотта и отношение каонов к пионам в модели EPNJL*, ЭЧАЯ **52**, 4, 911–912 (2021),

[http://www1.iinr.ru/Pepan/v-52-4/21\\_Blaschke\\_ann.pdf](http://www1.iinr.ru/Pepan/v-52-4/21_Blaschke_ann.pdf)

- [19] D. Goderidze, Yu.L. Kalinovsky, A.V. Friesen, *Pion damping width and pion spectral function in hot pion gas*, International Journal of Modern Physics A **37**, 2250135 (2022).
- [20] David Blaschke, Alexandra Friesen and Yuriy Kalinovsky, *Cancellation of the sigma mode in the thermal pion gas by quark Pauli blocking*, arXiv:submit/4650134 [hep-ph] 14 Dec. 2022.
- [21] B.F. Kostenko, Chapter 10. *Study of inelastic d-d and p-d interactions for observation of neutron-proton system under strong compression*, pp. 1077–1080, in V. Abramov et al., *Possible Studies at the First Stage of the NICA Collider Operation with Polarized and Unpolarized Proton and Deuteron Beams*, Physics of Particles and Nuclei **52**, 6, 1044–1119 (2021).
- [22] G. Musulmanbekov, *Hadron Modifications in a Dense Baryonic Matter*, Physics of Particles and Nuclei Letters **18**, 5, 548–558 (2021).
- [23] D.E. Alvarez-Castillo, J. Antoniadis, A. Ayriyan, D. Blaschke, V. Danchev, H. Grigorian, N.K. Largani, F. Weber, *Accretion-induced collapse to third family compact stars as trigger for eccentric orbits of millisecond pulsars in binaries*, Astronomische Nachrichten **340**, 878–884 (2019), First Published: 09 January 2020, <https://doi.org/10.1002/asna.201913752>
- [24] D. Blaschke, D.E. Alvarez-Castillo, A. Ayriyan, H. Grigorian, N.K. Largani, F. Weber, *Astrophysical Aspects of General Relativistic Mass Twin Stars*, Chapter 7 in *Topics on Strong Gravity, A Modern View on Theories and Experiments* (Ed. César Augusto Zen Vasconcellos), <https://doi.org/10.1142/11186>, World Scientific, 207–256, (2020).  
[https://doi.org/10.1142/9789813277342\\_0007](https://doi.org/10.1142/9789813277342_0007)
- [25] D. Alvarez-Castillo, A. Ayriyan, G. G. Barnafoldi, H. Grigorian, P. Posfay, *Studying the parameters of the extended sigma-omega model for neutron star matter*, Eur. Phys. J. Spec. Topics **229**, 3615–3628 (2020), <https://doi.org/10.1140/epjst/e2020-000106-4>
- [26] D.E. Alvarez-Castillo, A. Ayriyan, G.G. Barnafoldi, P. Posfay, *Studying the Landau Mass Parameter of the Extended Sigma-Model for Neutron Star Matter*, Physics of Particles and Nuclei **51**, 4, 725–729 (2020), <https://doi.org/10.1134/S1063779620040073>
- [27] D. Blaschke, A. Ayriyan, D.E. Alvarez-Castillo, H. Grigorian, *Was GW170817 a Canonical Neutron Star Merger? Bayesian Analysis with a Third Family of Compact Stars*, Universe **6**, 81 (2020), <https://doi.org/10.3390/universe6060081>
- [28] A. Ayriyan, D. Blaschke, A.G. Grunfeld, D. Alvarez-Castillo, H. Grigorian, V. Abgaryan, *Bayesian analysis of multimessenger M-R data with interpolated hybrid EoS*, Eur. Phys. J. A **57**, 318, 18 pp. (2021), <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-021-00619-0>
- [29] M. Ángeles Pérez-García, H. Grigorian, C. Albertus, D. Barba, J. Silk, *Cooling of Neutron Stars admixed with Light Dark Matter: a case study*, Phys. Lett. B **827**, 136937 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.136937>
- [30] K.A. Bugaev, O.V. Vitiuk, B.E. Grinyuk, N.S. Yakovenko, E.S. Zhrebtsova, V.V. Sagun, O.I. Ivanytskyi, D.O. Savchenko, L.V. Bravina, D.B. Blaschke, G.R. Farrar, S. Kabana, S.V. Kuleshov, E.G. Nikonov, A.V. Taranenko, E.E. Zabrodin, G.M. Zinovjev, *Chemical freeze-out of light nuclei in high energy nuclear collisions and resolution of the hyper-triton chemical freeze-out puzzle*, Journal of Physics Conference Series **1690**, 012123 (2020).
- [31] K.A. Bugaev, O.V. Vitiuk, B.E. Grinyuk, V.V. Sagun, N.S. Yakovenko, O.I. Ivanytskyi, G.M. Zinovjev, D.B. Blaschke, E.G. Nikonov, L.V. Bravina, E.E. Zabrodin, S. Kabana, S.V. Kuleshov, G.R. Farrar, E.S. Zhrebtsova, A.V. Taranenko, *Second virial coefficients of light nuclear clusters and their chemical freeze-out in nuclear collisions*, European Physical Journal A – Hadrons and Nuclei **56**, 293, 1–15 (2020), <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00296-5>
- [32] E.V. Zemlyanaya, V.K. Lukyanov, K.V. Lukyanov, D. Kadrev, M.K. Gaidarov, A.N. Antonov, K. Spasova, *Microscopic analysis of the  $^{12,14}\text{Be}$  scattering on  $^{12}\text{C}$  and protons*, Proceedings of International Symposium on Exotic Nuclei (World Scientific, Singapore, ISBN 978-981-120-944-4), 160–166, (2020).

[33] E.V. Zemlyanaya, V.K. Lukyanov, D.N. Kadrev, K.V. Lukyanov, A.N. Antonov, M.K. Gaidarov, *Analysis of scattering and breakup reactions of  $^{12,14}\text{Be}$  within the microscopic model of optical potential*, Journal of Physics Conference Series **1555**, 012017 (2020).

[34] K.V. Lukyanov, V.K. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, I. Abdul-Magead, *Pion-nucleus elastic scattering studies within the microscopic folding potential*, Journal of Physics Conference Series **1555**, 012018 (2020).

[35] М.В. Башашин, А. Ермекова, Е.В. Земляная, М.Б. Какенов, К.В. Лукьянов, *Анализ дифференциальных сечений  $^{12,14}\text{Be}+^{12}\text{C}$  при энергии 56 МэВ/нуклон на основе параллельной реализации четырех-параметрической микроскопической модели ядро-ядерного рассеяния*, Системный анализ в науке и образовании, 4, 10–19 (2020),

<https://doi.org/10.37005/2071-9612-2020-4-10-19>

[36] M. Bashashin, E. Zemlyanaya, M. Kakenov, A. Yermekova, K. Lukyanov, *Analysis of the  $^{12,14}\text{Be}+^{12}\text{C}$  Scattering Data within a Parallel Implementation of 4-Parameter Model*, AIP Conference Proceedings **2377**, 060003 (2021), <https://doi.org/10.1063/5.0063345>

[37] V.K. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, K.V. Lukyanov, I. Abdul-Magead, *Analysis of the Pion-Nucleus Scattering within the Folding and the Kisslinger Type Potentials*, Nuclear Physics A **1010**, 122190 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2021.122190>

[38] V.K. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, K.V. Lukyanov, I. Abdul-Magead, *Analysis of Pion-Nucleus Scattering Data within Microscopic Model of Optical Potential*, AIP Proceedings, to be publ. 2023

[39] M.K. Gaidarov, K.V. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, V.K. Lukyanov, D.N. Kadrev, A.N. Antonov, *Microscopic analysis of elastic scattering of one-proton halo nucleus  $^{17}\text{F}$  on different mass targets*, Physics of Particles and Nuclei **54**, 3 (2023).

[40] M. Kakenov, V.I. Kukulkin, V.N. Pomerantsev, O. Bayakhmetov, *Properties of dibaryons in nuclear medium*, Eur. Phys. J. A **56**, 266 (2020), <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00272-z>

[41] L.M. Donaldson, J. Carter, P. von Neumann-Cosel, V.O. Nesterenko, R. Neveling, P.-G. Reinhard, I.T. Usman, P. Adsley, C.A. Bertulani, J.W. Brummer, E.Z. Buthelezi, G.R.J. Cooper, R.W. Fearick, S.V. Fortsch, H. Fujita, Y. Fujita, M. Jingo, N.Y. Kheswa, W. Kleinig, C.O. Kureba, J. Kvasil, M. Latif, K.C.W. Li, J.P. Mira, F. Nemulodi, P. Papka, L. Pellegri, N. Pietralla, V.Yu. Ponomarev, B. Rebeiro, A. Richter, N.Yu. Shirikova, E. Sideras-Haddad, A.V. Sushkov, F.D. Smit, G.F. Steyn, J.A. Swartz, A. Tamii, *Fine structure of the isovector giant dipole resonance in  $^{142-150}\text{Nd}$  and  $^{152}\text{Sm}$* , Physical Review C **102**, 064327, 17 pp. (2020),

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.102.064327>

[42] N.Yu. Shirikova, A.V. Sushkov, L.A. Malov, E.A. Kolganova, R.V. Jolos, *Microscopically Derived Grodzins Relation and Prediction of the Excitation Energies of the  $2_1^+$  States for Some Superheavy Nuclei*, Physics of Particles and Nuclei **53**, 6, 1138–1141 (2022).

[43] N.Yu. Shirikova, A.V. Sushkov, L.A. Malov, E.A. Kolganova, R.V. Jolos, *Prediction of the excitation energies of the  $2_1^+$  states for superheavy nuclei based on the microscopically derived Grodzins relation*, Phys. Rev. C **105**, 024309, 6 pp. (2022).

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.024309>

[44] N.Yu. Shirikova, A.V. Sushkov, R.V. Jolos, *Coriolis mixing of the  $K = 1$  and  $K = 0$  mixed symmetry states in the well deformed even-even nuclei*, Eur. Phys. J. A **58**, 98, 6 pp. (2022), <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00748-0>

[45] E.B. Balbutsev, I.V. Molodtsova, A.V. Sushkov, N.Yu. Shirikova, P. Schuck, *Spin-isospin structure of the nuclear scissors mode*, Phys. Rev. C **105**, 044323, 20 pp. (2022), <https://journals.aps.org/prc/pdf/10.1103/PhysRevC.105.044323>

[46] P.W. Wen, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, R.G. Nazmitdinov, A.K. Nasirov, S.I. Vinitzky, C.J. Lin, H.M. Jia, *Near-barrier heavy-ion fusion: Role of boundary conditions in coupling of channels*, Physical Review C **101**, 1, 014618 (2020),

<https://journals.aps.org/prc/abstract/10.1103/PhysRevC.101.014618>

- [47] T.I. Mikhailova, B. Erdemchimeg, M. Di Toro, H.H. Wolter, *Characteristics of heavy-ion fragmentation reactions at Fermi energies*, (report to the conference Nucleus-2021), to be published in PEPAN **54**, (2023).
- [48] Т.И. Михайлова, Б. Эрдэмчимэг, Ю.М. Середа, *Скоростные распределения вперед летящих фрагментов в столкновениях тяжелых ионов при энергиях, близких к энергии Ферми*, ВМУ. Серия 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. **78**, 1), 2310301, 8 pp. (2023).
- [49] T.I. Mikhailova, B. Erdemchimeg, S.A. Klygin, G.A. Kononenko, Yu.M. Sereda, A.N. Vorontsov, *Velocity and Isotope Distributions of Projectile-Like Fragments in Reaction  $^{40}\text{Ar}$  (36.5 AMeV)/ $^9\text{Be}$* , *Physics of Atomic Nuclei* **86**, 4, (2023) (in print).
- [50] T.I. Mikhailova, B. Erdemchimeg, *Modeling of Heavy-Ion Fragmentation Reactions in Transport-Statistical Approach*, report to Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems 2023 (ITTMM-2023, Moscow, Russia, April 17–21, 2023).
- [51] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *On ultrafast polarization switching in ferroelectrics*, *Phys. Rev. Research* **2**, 028002-3, (2020), DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.028002  
<https://journals.aps.org/prresearch/abstract/10.1103/PhysRevResearch.2.028002>
- [52] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Method of dynamic resonance tuning in spintronics of nanosystems*, *Laser Physics Letters* **19**, 116001 (2022).
- [53] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Self-similar extrapolation of nonlinear problems from small-variable to large-variable limit*, *Int. J. Mod. Phys. B* **34**, 2050208-13 (2020).
- [54] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Self-similar extrapolation in quantum field theory*, *Phys. Rev. D* **103**, 076019-18 (2021), <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.103.076019>
- [55] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *From asymptotic series to self-similar approximants*, *Physics* **3**, 829–878 (2021), <https://doi.org/10.3390/physics3040053>
- [56] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Self-similar sequence transformation for critical exponents*, *Phys. Lett. A* **425**, 127899 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127899>
- [57] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Statistical model of a superfluid solid*, *Physics Letters A* **457**, 128559-9 (2023).
- [58] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Models of mixed matter*, PEPAN **54**, 1–68 (2023).
- [59] E.G. Nikonov, M. Popovicova, V.V. Korenkov, E. Litavcova, *Numerical Investigation of the Water Vapour Diffusivity inside Homogeneous Porous Media*, EPJ Web of Conferences **226**, 02017 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602017>
- [60] Э.Г. Никонов, М. Поповичова, *Математическое исследование паропроницаемости поверхностного слоя вещества с однородной пористой структурой*, *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования* **3**, 95–102 (2020). English transl.: E.G. Nikonov, M. Popovicova, *Mathematical study of the water-vapor permeability of the surface layer of a homogeneous porous material*, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* **14**, 2, 298–305 (2020).
- [61] E. Ayryan, D. Divakov, A. Egorov, K. Lovetskiy, L. Sevastianov, *Modelling Leaky Waves in Planar Dielectric Waveguides*, EPJ Web of Conferences **226**, 02003, 4 pp. (2020), <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602003>
- [62] A.A. Egorov, A.S. Ayriyan, E.A. Ayriyan, *Irregular liquid crystal waveguide structures: analysis of quasi-stationary fluctuations, power loss and statistical properties of irregularities*, *Journal of Radio Electronics* **4**, 1–17 (2020), <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2020.4.3>
- [63] A. Ayriyan, E.A. Ayryan, A.A. Egorov, M. Timko, P. Kopcansky, *Properties of Liquid Crystal Wave-Guiding Structures*, *Soft Matter* **38**, 18, 7441–7451 (2022).  
<https://doi.org/10.1039/d2sm00597b>.
- [64] I.V. Barashenkov, A. Chernyavsky, *Stable solitons in a nearly PT-symmetric ferromagnet with spin-transfer torque*, *Physica D: Nonlinear Phenomena* **409**, 132481, 10 pp. (2020).

[65] I.V. Barashenkov, D. Feinstein, *Gyrating solitons in a necklace of waveguides*, Physical Review A **103**, 2, 023532 (2021), <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.023532>

[66] И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И.Г. Христов, Р.Д. Христова, З.К. Тухлиев, З.А. Шарипов, *Молекулярно-динамическое моделирование процессов взаимодействия импульсных пучков ионов с металлами*, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **12**, 78–82 (2020). English translation: I.V. Puzynin, T.P. Puzynina, I.G. Hristov, R.D. Hristova, Z.K. Tukhliev, Z.A. Sharipov, *Molecular-Dynamics Simulation of the Interaction Processes of Pulsed Ion Beams with Metals*, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **14**, 1342–1345 (2020). <https://doi.org/10.1134/S1027451020060427>

[67] З.А. Шарипов, Б. Батгэрэл, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И.Г. Христов, Р.Д. Христова, З.К. Тухлиев, *Моделирование процессов взаимодействия нанокластеров меди с металлическими мишенями со структурой реальных кристаллов с дефектами типа пор*, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **8**, 19–24 (2022). <https://sciencejournals.ru/view-article/?j=poverh&y=2022&v=0&n=8&a=Poverh2208013Sharipov>  
English translation: Z.A. Sharipov, B. Batgerel, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina, I.G. Hristov, R.D. Hristova, Z.K. Tukhliev, *Simulation of the Interaction Processes between Copper Nanoclusters and Metal Targets with Pore-Type Defects*, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, **16**, 4, 576–580 (2022).

[68] I.V. Amirkhanov, N.R. Sarker, I. Sarkhadov, *Numerical modeling of laser ablation of materials*, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **28**, 4, 398–405 (2020), DOI: <https://doi.org/10.22363/2658-4670-2020-28-4-398-405>

[69] I.V. Amirkhanov, N.R. Sarker, I. Sarkhadov, *Numerical simulation of thermal processes occurring in materials under the action of femtosecond laser pulses*, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **29**, 1, 5–13 (2021).

[70] И.В. Амирханов, И. Сархадов, З.К. Тухлиев, *Моделирование тепловых процессов, возникающих в материалах под действием лазерных импульсов, в рамках гиперболической модели термического пика*, JINR Preprint P11-2022-31 (2022), submitted to J. Surf. Investigations (2023).

[71] И.В. Амирханов, И. Сархадов, З.К. Тухлиев, Х. Гафуров, *Численное исследование влияния конечной толщины образца на лазерную абляцию материалов*, JINR Preprint P11-2022-32 (2022), Направлено в журнал Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования (2023).

[72] O.I. Ivankov, E.V. Ermakova, T.N. Murugova, D.R. Badreeva, E. Dushanov, T. Kondela, Kh. Kholmurodov, A.I. Kuklin, N. Kučerka, *Interactions in the model membranes mimicking preclinical conformational diseases*, Advances in Biomembranes and Lipid Self-Assembly **31**, 185–214 (2020), <http://doi.org/10.1016/bs.abl.2020.02.002>

[73] [O. Ivankov, T.N. Murugova, E.V. Ermakova, T. Kondela, D.R. Badreeva, P. Hrubovčák, D. Soloviov, A. Tsarenko, A. Rogachev, A.I. Kuklin, N. Kučerka, *Amyloid-beta peptide (25–35) triggers a reorganization of lipid membranes driven by temperature changes*, Scientific Reports (Springer Nature) **11**, 21990, 9 pp. (2021), <https://doi.org/10.1038/s41598-021-01347-7> ]

[74] T. Kondela, P. Hrubovčák, D. Soloviov, D. Badreeva, T. Murugova, V. Skoi, A. Kuklin, O. Ivankov, N. Kučerka, *Approaches for a Closer Look at Problems of Liquid Membranes with Amyloid-Beta Peptides*, Chapter 10 in: L. Bulavin and N. Lebovka (eds.), *Soft Matter Systems for Biomedical Applications*, Springer Proceedings in Physics **266**, 265–294 (2022), [https://doi.org/10.1007/978-3-030-80924-9\\_10](https://doi.org/10.1007/978-3-030-80924-9_10)

[75] O. Ivankov, D.R. Badreeva, E.V. Ermakova, T. Kondela, T.N. Murugova, N. Kučerka, *Anionic lipids modulate little the reorganization effect of amyloid-beta peptides on membranes*, Gen. Physiol. Biophys. **42**, (2023) (in print), Doi: 10.4149/gpb\_2022052

- [76] M. Bashashin, E. Zemlyanaya, M. Kiselev, K. Lukyanov, K. Turapbay, *SFF Analysis of Small Angle Scattering Data from Phospholipid Vesicle Systems: Parallel Implementation and Online Interface*, Physics of Particles and Nuclei Letters **19**, 5, 554–557 (2022).
- [77] М.А. Киселев, Е.В. Земляная, Е.И. Жабицкая, М.В. Башашин, А.И. Иваньков, *Исследование возможностей анализа везикулярной структуры нанолечеств на основе ФТНС по данным малоуглового рассеяния нейтронов*, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **1**, 3–8 (2023). English translation: M.A. Kiselev, E.V. Zemlyanaya, E.I. Zhabitskaya, M.V. Bashashin, O.I. Ivankov, *Investigation of the Possibilities of Analyzing the Vesicular Structure of PTNS-Based Nanodrugs Using Small-Angle Neutron Scattering Data*, Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques **17**, 1, 1–6 (2023), <https://doi.org/10.1134/S102745102.3010111>
- [78] S.I. Vinitzky, A.A. Gusev, V.L. Derbov, P.M. Krassovitskiy, F.M. Pen'kov, G. Chuluunbaatar, *Reduced SIR Model of the COVID-19 Pandemic*, Computational Mathematics and Mathematical Physics **61**, 3, 376–387 (2021); *Редуцированная модель SIR пандемии COVID-19*, ЖВМиМФ **61**, 3, 400–412 (2021), <https://www.doi.org/10.1134/S0965542521030155>
- [79] V.S. Rikhvitsky, [PROGRAM LIBRARY JINRLIB](https://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sir-model/indexe.html), *SIR-model – the simplest epidemic process model* (May 20, 2020), <https://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sir-model/indexe.html>
- [80] V.P. Tsvetkov, S.A. Mikheev, I.V. Tsvetkov, V.L. Derbov, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, *Modeling the multifractal dynamics of COVID-19 pandemic*, Chaos, Solitons and Fractals **161**, 112301 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.112301>
- [81] I.V. Amirkhanov, I.S. Kolosova, S.A. Vasilyev, *Asymptotic solution of Sturm-Liouville problem with periodic boundary conditions for relativistic finite difference Schrödinger equation*, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science **28**, 3, 230–251 (2020), DOI: <https://doi.org/10.22363/2658-4670-2020-28-3-230-251>
- [82] L.G. Afanasyev, S.R. Gevorkyan, O.O. Voskresenskaya, *Dimesoatom Breakup in the Coulomb Field*, Eur. Phys. J. A **56**, 10, 8 pp. (2020), <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-019-00017-7>
- [83] P.B. Kats, K.V. Halenka, O.O. Voskresenskaya, *Normalized Mott Cross Section in Different Approaches*, Physics of Particles and Nuclei Letters **18**, 277–283 (2021).
- [84] P.B. Kats, K.V. Halenka, O.O. Voskresenskaya, *Comparison of the Lindhard-Sørensen and Mott-Bloch Corrections to the Bethe Stopping Formula at Moderately Relativistic Energies*, Physics of Particles and Nuclei Letters **18**, 267–276 (2021).
- [85] O.O. Voskresenskaya, N.A. Skorik, *Relative Kinetic Stability of Cerium(IV) Complexes with Some Organic Compounds of the Aliphatic Series*, Russian Journal of Inorganic Chemistry **90**, 3, 434–443 (2020).
- [86] O.O. Voskresenskaya, N.A. Skorik, *Relative kinetic stability towards redox decomposition of cerium(IV) complexes with some organic compounds*, Monatshefte fuer Chemie – Chemical Monthly **151**, 4, 533–542 (2020).
- [87] А.В. Волохова, Е.В. Земляная, В.В. Качалов, В.С. Рихвицкий, *Моделирование процесса истощения газоконденсатного пласта*, Компьютерные исследования и моделирование **12**, 5, 1081–1095 (2020), DOI: <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2020-12-5-1081-1095>
- [88] В.В. Иванов, А.В. Крянев, Д.Е. Слива, Ю.А. Ульянин, В.В. Харитонов, *Математическое моделирование процесса истощения добываемых ископаемых ресурсов на примере природного урана*, Письма в ЭЧАЯ **17**, 2(227), 225–229 (2020)
- [89] J. Buša, M. Dovica, M. Zhabitsky, *Using a Gauge Block for Derivation of Parameters of Four Laser Triangulation Sensors in a Local Coordinate System*, Measurement Science Review **20**, 5, 210–217 (2020), <https://www.measurement.sk/2020/msr-2020-0026.pdf>
- [90] N. Makhdaliani, *Nonperturbative extension of perturbative quantum chromodynamics and fractal dimension of space as a confinement phase transition order parameter*, J. Phys.: Conf. Ser. **1435**, 012055 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1435/1/012055>

- [91] M. Bures, N. Makhaldiani, *Space Dimension Renormdynamics*, *Particles*, **3**, 364–379 (2020), DOI: <https://doi.org/10.3390/particles3020028>
- [92] E.A. Ayryan, M.D. Malykh, L.A. Sevastianov, Yu. Ying, *On Periodic Approximate Solutions of the Three-Body Problem Found by Conservative Difference Schemes*, *LNCS* **12291**, 77–90 (2020), [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-60026-6\\_5](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-60026-6_5)
- [93] E.A. Ayryan, M. Hnatic, V.B. Malyutin, *Approximate evaluation of functional integrals generated by the relativistic Hamiltonian*, *Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series* **56**, 1, 72–83 (2020), (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-2430-2020-56-1-72-83>
- [94] E.E. Perepelkin, A.D. Kovalenko, B.I. Sadovnikov, N.G. Inozemtseva, A.A. Tarelkin, R.V. Polyakova, M.B. Sadovnikova, N.M. Andronova, E. Scherkhanov, *Exactly Solvable Models for the First Vlasov Equation*, *Physics of Particles and Nuclei* **51**, 879–941 (2020), <https://doi.org/10.1134/S1063779620050068>
- [95] B. Saha, *Interacting self-consistent system of spinor and gravitational fields*, *Int. J. Mod. Phys. A* **35**, 2040047 (2020), <https://doi.org/10.1142/S0217751X20400473>
- [96] B. Saha, *Non-minimally coupled nonlinear spinor field in FRW cosmology*, *Astrophys. Space Sci.* **365**, 68, (2020), <https://doi.org/10.1007/s10509-020-03780-y>
- [97] K.A. Bronnikov, Yu.P. Rybakov, B. Saha, *Spinor fields in spherical symmetry: Einstein–Dirac and other space-times*, *European Physical Journal Plus* **135**, 124, (2020), <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-020-00150-z>
- [98] B. Saha, E.I. Zakharov, V.S. Rikhvitsky, *Spinor field in a spherically symmetric Friedmann Universe*, *Discrete & Continuous Models & Applied Computational Science* **28**, 2, 132–141 (2020).
- [99] B. Saha, *Spinors in cylindrically-symmetric space-time*, *Universe* **6**, 152 (2020) DOI: [10.3390/universe6090152](https://doi.org/10.3390/universe6090152)
- [100] A.S. Gavrikov, B. Saha, V.S. Rikhvitsky, *Applying Friedmann models to describe the evolution of the Universe based on data from the SAI Supernovae Catalog*, *Discrete & Continuous Models & Applied Computational Science*, **28**, 2, 120–131, (2020)
- [101] B. Saha, *Static spherically symmetric space-time: some remarks*, *Romanian Journal of Physics*, **66**, 113, 11 pp. (2021), [https://rjp.nipne.ro/2021\\_66\\_7-8/RomJPhys.66.113.pdf](https://rjp.nipne.ro/2021_66_7-8/RomJPhys.66.113.pdf)
- [102] G. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, V.P. Gerdt, S.I. Vinitzky, V.L. Derbov, A. Gózdź, P.M. Krassovitskiy, L.L. Hai, *Construction of Multivariate Interpolation Hermite Polynomials for Finite Element Method*, *EPJ Web of Conferences* **226**, 02007, 4 pp. (2020), DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602007>
- [103] V.L. Derbov, G. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, A. Gózdź, P.M. Krassovitskiy, A.V. Mitin, *On calculations of metastable and Rydberg states of diatomic beryllium molecule and antiprotonic helium atom*, *Proc. SPIE* **11458**, 114580Q-1-11, (2020).
- [104] G. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, L. Le Hai, *KANTBP 4M Program for Solving the Scattering Problem for a System of Ordinary Second-Order Differential Equations*, *EPJ Web of Conferences* **226**, 02008, 4 pp. (2020), DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602008>
- [105] S.I. Vinitzky, P.W. Wen, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, R.G. Nazmitdinov, A.K. Nasirov, C.J. Lin, H.M. Jia, A. Gózdź, *Application of KANTBP program of finite element method in the coupled-channels calculations for heavy-ion fusion reactions*, *Acta Physica Polonica B Proceedings Supplement* **13**, 3, 549–558 (2020).
- [106] V.L. Derbov, G. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, A. Gózdź, P.M. Krassovitskiy, I. Filikhin, A.V. Mitin, *Spectrum of beryllium dimer in ground  $X^1\Sigma_g^+$  state*, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **262**, 107529-1–10 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107529> ;

- [107] G. Chuluunbaatar, A. Gusev, V. Derbov, S. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, V. Gerdt, *A Maple implementation of the finite element method for solving boundary-value problems for systems of second-order ordinary differential equations*, Communications in Computer and Information Science **1414**, 152–166 (2021), [https://doi.org/10.1007/978-3-030-81698-8\\_11](https://doi.org/10.1007/978-3-030-81698-8_11);
- [108] A. Deveikis, A. Gusev, S. Vinitzky, A. Gózdź, A. Pedrak, C. Burdik, G. Pogosyan, *Symbolic-Numeric Algorithms for Computing Orthonormal Bases of SU(3) Group for Orbital Angular Momentum*, Lecture Notes in Computer Science **12865**, 100–120 (2021).
- [109] O. Chuluunbaatar, S. Obeid, B.B. Joulakian, A.A. Gusev, P.M. Krassovitskiy, L.A. Sevastianov, *D<sub>3h</sub> symmetry adapted correlated three center wave functions of the ground and the first five excited states of H<sub>3</sub><sup>+</sup>*, Chemical Physics Letters **746**, 137304 (2020).
- [110] Gh. Adam, S. Adam, *Local versus Global Decisions in Bayesian Automatic Adaptive Quadrature*, EPJ Web of Conferences **226**, 01001, 8 pp. (2020), <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022601001>
- [111] Gh. Adam, S. Adam, *A priori Knowledge Driven Input to Bayesian Two-Rule Automatic Adaptive Quadrature*, Invited lecture at TIM 22 Physics Conference, AIP Conf. Proceedings, accepted (2022).
- [112] N.D. Dikumar, *Numerical solution of the Cauchy problem based on the basic element method*, Matem. Mod. **35** (2023) (Accepted) (English version); Н.Д. Дикусар, *Численное решение задачи Коши на основе метода базисных элементов*, Матем. Моделирование **35** (2023) (принята к публикации) (Русский).
- [113] J. Buša Jr., J. Buša, E. Ayryan, Sh. Hayryan, C.-K. Hu, I. Pokorný, J. Skřivánek, *PBCAVE: Program for exact classification of the mesh points of a protein with possible internal cavities and its application to Poisson–Boltzmann equation solution*, Computer Physics Communications **250**, 107003, 12 pp. (2020), <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2019.107003>
- [114] I. Hristov, R. Hristova, S. Dimova, P. Armyanov, N. Shegunov, I. Puzynin, T. Puzynina, Z. Sharipov, Z. Tuxhliev, *Parallelizing multiple precision Taylor series method for integrating the Lorenz system*, In: I. Georgiev, H. Kostadinov, E. Lilkova (eds), *Advanced Computing in Industrial Mathematics*, BGSIAM 2020, Studies in Computational Intelligence **1076**, 56–66 (2023), [https://doi.org/10.1007/978-3-031-20951-2\\_6](https://doi.org/10.1007/978-3-031-20951-2_6)
- [115] T.M. Solovjeva, A.G. Soloviev, *Data analysis with parallel tools of ROOT*, Communication at the Conference Parallel Computational Technologies (PCT) 2023, March 28–30, 2023, ITMO Univ., St.-Petersburg, Russia.
- [116] V. Elvira, L. Fields, K.L. Genser, R. Hatcher, V. Ivanchenko, M. Kelsey, T. Koi, G.N. Perdue, A. Ribon, V. Uzhinsky, D.H. Wright, J. Yarba, S.Y. Jun, *GEANT4 parameter tuning using Professor*, J. Inst. **15**, P02025 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1088/1748-0221/15/02/p02025>
- [117] A.S. Galoyan, V.V. Uzhinsky, *Using the HIJING Model in Modeling Nucleus-Nucleus Interaction at Energies of Nucleon-Nucleon Collisions 5–15 GeV*, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Series Physics **84**, 4, 446–450 (2020) (Russian original in Известия РАН серия физическая **84**, 4, 577–581 (2020)).
- [118] A. Galoyan, A. Ribon, V. Uzhinsky, *Towards model descriptions of the latest data by the NA61/SHINE collaboration on <sup>40</sup>Ar + <sup>45</sup>Sc and <sup>7</sup>Be + <sup>9</sup>Be interactions*, Eur. Phys. J. C **82**, 181, 8 pp. (2022), <https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-022-10116-3>
- [119] E. Alexandrov, I. Alexandrov, A. Degtyarev, K. Gertsenberger, I. Filozova, P. Klimai, A. Nozik, A. Yakovlev, *Design of the Event Metadata System for the Experiments at NICA*, PEPAN Letters **18**, 603–616 (2021).
- [120] K. Gertsenberger, I. Alexandrov, I. Filozova, E. Alexandrov, A. Moshkin, A. Chebotov, M. Mineev, D. Pryahina, G. Shestakova, A. Yakovlev, A. Nozik, P. Klimai, *Development of Information Systems for Online and Offline Data Processing in the NICA Experiments*, Physics of Particles and Nuclei **52**, 4, 801–807 (2021).



- [121] E. Akishina, E. Alexandrov, I. Alexandrov, I. Filozova, K. Gertsenberger, V. Ivanov, *Development of a Geometry Database and Related Services for the NICA Experiments*, Physics of Particles and Nuclei **52**, 842–846 (2021).
- [122] E. Alexandrov, I. Alexandrov, A. Degtyarev, I. Filozova, K. Gertsenberger, P. Klimai, A. Yakovlev, *Development of the Event Metadata System for the NICA Experiments*, CEUR Workshop Proceedings **3041**, 439–444 (2021), <http://ceur-ws.org/Vol-3041/439-444-paper-81.pdf>
- [123] K. Gertsenberger, A. Chebotov, P. Klimai, I. Alexandrov, E. Alexandrov, I. Filozova, A. Moshkin, *Implementation of the Condition Database for the Experiments of the NICA Complex*, CEUR Workshop Proceedings **3041**, 128–132 (2021), <http://ceur-ws.org/Vol-3041/128-132-paper-23.pdf>
- [124] E. Alexandrov, I. Alexandrov, A. Chebotov, K. Gertsenberger, I. Filozova, D. Priakhina, G. Shestakova, *Status of the Configuration Information System for the NICA Experiments*, Physics of Particles and Nuclei Letters **19**, 5, 543–546 (2022).  
<https://link.springer.com/article/10.1134/S1547477122050041>
- [125] E. Alexandrov, I. Alexandrov, A. Chebotov, K. Gertsenberger, I. Filozova, D. Priakhina, G. Shestakova, *Configuration Information System for online processing and data monitoring in the NICA experiments*, Journal of Physics: Conference Series **2438**, 012019 (2023), <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/2438/1/012019>
- [126] E. Alexandrov, I. Alexandrov, A. Chebotov, A. Degtyarev, I. Filozova, K. Gertsenberger, P. Klimai, A. Yakovlev, *Implementation of the Event Metadata System for physics analysis in the NICA experiments*, Journal of Physics: Conference Series **2438**, 012046 (2023), <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/2438/1/012046>
- [127] D. Baranov, P. Batyuk, K. Gertsenberger, S. Merts, *Track Reconstruction in the BM@N Experiment*, EPJ Web of Conferences **226**, 03003, 4 pp. (2020),  
DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022603003>
- [128] D. Baranov, *Geometry design for BM@N detectors: status and preparation for the next runs*, 5th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, April 20, 2020.
- [129] D. Baranov, *Geometry update for inner tracker detectors of the BM@N setup for RUN-7 and the next run configurations and in future heavy ion runs*, 6th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, October 26, 2020.
- [130] E. Akishina, E. Alexandrov, I. Alexandrov, I. Filozova, K. Gertsenberger, V. Ivanov, D. Priakhina, G. Shestakova, *Development of the Geometry Database for the BM@N Experiment of the NICA Project*, EPJ Web of Conferences **226**, 03003, 4 pp. (2020),  
DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022603001>
- [131] E.P. Akishina, E.I. Alexandrov, I.N. Alexandrov, I.A. Filozova, K.V. Gertsenberger, V.V. Ivanov, D.I. Pryahina, G.V. Shestakova, *Development of a geometry database for the BM@N experiment of mega-project NICA*, 5th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, April 20, 2020.
- [132] E.P. Akishina, E.I. Alexandrov, I.N. Alexandrov, I.A. Filozova, K.V. Gertsenberger, V.V. Ivanov, *Development of the Geometry Database and related services for the NICA experiments*, 6th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, October 26, 2020.
- [133] L. Kovachev, V. Palichik, N. Voytishin, *DCH in RUN7: MC vs. data & Gem + DCH + tof700 matching with MC data*, Report at 5<sup>th</sup> BM@N Collaboration Meeting, April 20, 2020,  
[https://indico.jinr.ru/event/1159/contributions/9042/attachments/7045/9784/20\\_04\\_20-Voytishin\\_Palichik-DCH\\_run7\\_MC\\_vs\\_data5thColMeeting.pdf](https://indico.jinr.ru/event/1159/contributions/9042/attachments/7045/9784/20_04_20-Voytishin_Palichik-DCH_run7_MC_vs_data5thColMeeting.pdf)
- [134] K. Gertsenberger, S. Merts, I. Gabdrakhmanov, I. Filozova, I. Alexandrov, E. Alexandrov, A. Moshkin, A. Chebotov, *Software Development for the BM@N Experiment at NICA: Challenges and Status*, EPJ Web of Conferences **226**, 03008, 4 pp. (2020),  
<https://doi.org/10.1051/epjconf/202022603008>

- [135] M. Patsyuk, J. Kahlbow, G. Laskaris, M. Duer, V. Lenivenko, E.P. Segarra, T. Atovullaev, G. Johansson, T. Aumann, A. Corsi, O. Hen, M. Kapishin, V. Panin, E. Piasetzky and the BM@N Collaboration: MLIT co-authors: D. Baranov, G. Musulmanbekov, V. Palchik, O. Streltsova, N. Voytishin, M. Zuev, *Unperturbed inverse kinematics nucleon knockout measurements with a carbon beam*, *Nature Physics* **17**, 693–699 (2021), <https://doi.org/10.1038/s41567-021-01193-4>
- [136] M. Patsyuk, T. Atovullaev, A. Corsi, O. Hen, G. Johansson, J. Kahlbow, V. Lenivenko, S. Merts, V. Palichik, V. Panin, Yu. Petukhov, E. Piasetzky, M. Romyantsev, Yu. Uzikov, N. Voytishin, *BM@N Data Analysis Aimed at Studying SRC Pairs: One-Step Single Nucleon Knockout Measurement in Inverse Kinematics Out of a 48 GeV/c  $^{12}\text{C}$  Nucleus*, *Physics of Particles and Nuclei* **52**(4), 631–636 (2021), <https://doi.org/10.1134/S1063779621040481>; [http://www1.jinr.ru/Pepan/v-52-4/25\\_Patsyuk\\_ann.pdf](http://www1.jinr.ru/Pepan/v-52-4/25_Patsyuk_ann.pdf)
- [137] D. Baranov, *Software development for Monte-Carlo simulation and hit-reconstruction for tracking detectors in the next runs of the BM@N experiment in 2021–2022*, The XXV International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2021) October 11–15, 2021, [https://lit.jinr.ru/sites/lit.jinr.ru/files/pdf/Baranov\\_AYSS-2021.pdf](https://lit.jinr.ru/sites/lit.jinr.ru/files/pdf/Baranov_AYSS-2021.pdf)
- [138] D. Baranov, V. Palichik, M. Patsyuk, N. Voytishin, *Reconstruction of simulated and experimental data in the Drift Chambers of the BM@N experiment*, Alushta-2021, 2021-06-10, [https://lit.jinr.ru/sites/lit.jinr.ru/files/pdf/21\\_06\\_10-Voytishin\\_DCH\\_run7\\_MC\\_vs\\_data\\_alushta.pdf](https://lit.jinr.ru/sites/lit.jinr.ru/files/pdf/21_06_10-Voytishin_DCH_run7_MC_vs_data_alushta.pdf)
- [139] D. Baranov, *Software Development for Tracking Detectors in the BM@N Experiment*, *Phys. Part. Nuclei Lett.* **19**, 5, 550–553 (2022).
- [140] V. Palichik, N. Voytishin, *Reconstruction of Simulated and Experimental Data in the Drift Chambers of the BM@N Experiment*, *Phys. Part. Nuclei Lett.* **19**, 501–504 (2022).
- [141] M. Baznat, A. Botvina, G. Musulmanbekov, V. Toneev, V. Zhezher, *Monte-Carlo Generator of Heavy Ion Collisions DCM-SMM*, *Phys. Part. Nuclei Lett.* **17**(3), 303–324 (2020).
- [142] M. Baznat, A. Botvina, K. Gudima, G. Musulmanbekov, V. Toneev, V. Zhezher, *Monte-Carlo Generator DCM-SMM*, 5th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, April 20, 2020.
- [143] V. Lenivenko, G. Musulmanbekov, V. Palichik, M. Patsyuk,  *$^{12}\text{C}$  fragmentation in Carbon-proton collisions. Comparison of SRC data with DCM-SMM generator*, 5th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, April 20, 2020.
- [144] G. Musulmanbekov, V. Zhezher, *New Monte-Carlo generator of heavy ion collisions DCM-SMM and its usage for NICA mega project*, Conference “RFBR grants for NICA”, Oct. 20–23, 2020, <https://indico.jinr.ru/event/1469/contributions/10247/>
- [145] G. Musulmanbekov, V. Zhezher, *Simulation of Nuclear Fragments in Heavy Ion Collisions by Monte-Carlo Generators*, *Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei* **52**, 4, 598 – 603 (2021), <https://link.springer.com/article/10.1134/S1063779621040456>
- [146] J. Buša Jr., S. Hnatič, O.V. Rogachevsky, *Performance Analysis and Optimization of MPDRoot*, CEUR Workshop Proceedings, CEUR Workshop Proceedings **3041**, 75–79 (2021).
- [147] J. Buša Jr., S. Hnatič, V.V. Korenkov, O.V. Rogachevsky, M. Vaľa, J. Vrláková, *Unified Software Development and Analysis Environment for MPD Experiment at NICA Collider*, *Modern Information Technologies and IT-Education* **18**, 1, 176–182 (2022), doi: <https://doi.org/10.25559/SITITO.18.202201.176-182>
- [148] V. Abgaryan et al. (MPD Collaboration), *Status and initial physics performance studies of the MPD experiment at NICA*, *European Physical Journal A* **58**, 7, 140, 50 pp. (2022), <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00750-6>
- [149] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Search for an excited lepton that decays via a contact interaction to a lepton and two jets in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV*, *Journal of High Energy Physics* **05**, 052 (2020).

[150] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Performance of the reconstruction and identification of high-momentum muons in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV*, *Journal of Instrumentation*, JINST **15**, P02027 (2020).

[151] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Inclusive search for highly boosted Higgs bosons decaying to bottom quark-antiquark pairs in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV*, *JHEP* **12**, 085 (2020).

[152] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *A measurement of the Higgs boson mass in the diphoton decay channel*, *Phys. Lett. B* **805**, 135425 (2020).

[153] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *A search for the standard model Higgs boson decaying to charm quarks*, *JHEP* **03**, 131 (2020).

[154] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Search for resonant pair production of Higgs bosons in the  $bbZZ$  channel in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV*, *Phys. Rev. D* **102**, 032003 (2020).

[155] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Search for decays of the 125 GeV Higgs boson into a Z boson and a Rho and Phi meson*, *JHEP* **11**, 039 (2020).

[156] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Search for a heavy Higgs boson decaying to a pair of W bosons in proton-proton collisions at  $\sqrt{s} = 13$  TeV*, *JHEP* **03**, 034 (2020).

[157] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *Search for a heavy pseudoscalar Higgs boson decaying into a 125 GeV Higgs boson and a Z boson in final states with two tau and two light leptons at  $\sqrt{s} = 13$  TeV*, *JHEP* **03**, 065 (2020).

[158] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *A deep neural network for simultaneous estimation of b jet energy and resolution*, *Computing and Software for Big Science* **4**, 10 (2020).

[159] A.M. Sirunyan, ..., V. Palichik, ..., N. Voytishin, ..., *A deep neural network to search for new long-lived particles decaying to jets*, *Mach. Learn. Sci. Technol.* **1**, 035012 (2020).

[160] V. Palichik, N. Voytishin, *Cathode Strip Chambers Hit Reconstruction improvements in the CMS Experiment*, 9-я ежегодн. конф. молодых ученых и специалистов ОИЯИ, Алушта-2020, 26 сент–3 окт, 2020.

[161] [V. Palichik, N. Voytishin, Hit reconstruction enhancement in cathode-strip chambers of the CMS experiment, Meeting of the Programme Advisory Committee for Particle Physics, January 24, 2022]

[162] V.V. Palichik, N.N. Voitishin, *Trajectory Reconstruction in the Cathode-Strip chambers of the CMS experiment*, *Phys. Part. Nucl. Lett.*, (accepted, 2022)

[163] ATLAS Workshops (CERN): *EventIndex* (Feb. 10, 2020); *S&C* (Feb. 11, 2020; June 16, 2020; Oct. 6, 2020).

[164] Рабочее совещание по текущей работе в эксперименте АТЛАС (ЛЯП ОИЯИ) (ATLAS weekly JINR workshop), June 18, 2020.

[165] A. Kazarov, I. Aleksandrov, G. Avolio, M. Caprini, A. Chitan, A. Corso Radu, A. Kazymov, G. Lehmann Miotto, M. Mineev, A. Santos, I. Soloviev, M. Vasile, G. Unel, *The Controls and Configuration Software of the ATLAS Data Acquisition Systems for LHC Run 2, 19th International Workshop on Advanced Computing and Analysis Techniques in Physics Research*, *J. Phys. Conf. Series* **1525**, 012036 (2020),  
DOI: <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1525/1/012036>

[166] M. Villaplana Perez, E. Alexandrov, I. Aleksandrov, Z. Baranowski, D. Barberis, G. Dimitrov, A. Fernandez Casani, E. Gallas, C. Garcia Montoro, S. Gonzalez de la Hoz, J. Hrivnac, I. Alexander, A. Kazymov, M. Mineev, F. Prokoshin, G. Rybkin, J. Sanchez, J. Salt, P.T. Vasileva, *The ATLAS EventIndex and its evolution towards Run 3*, *J. Phys.: Conf. Ser.* **1525**, 012056 (2020).

[167] E. Cherepanova, E. Alexandrov, I. Alexandrov, D. Barberis, L. Canali, A. Fernandez Casani, E. Gallas, C. Garcia Montoro, S. De La Hoz, J. Hrivnac, A. Kazymov, M. Mineev, F. Prokoshin, G.

- Rybkin, J. Sanchez, J. Salt Cairols, M. Perez, A. Yakovlev, *The ATLAS Eventindex Using the HBase/Phoenix Storage Solution*, CEUR Workshop Proceedings, 17–25 (in print);
- [168] E. Alexandrov, I. Alexandrov, D. Barberis, F. Prokoshin, A. Yakovlev, *Development of the ATLAS Event Picking Server*, CEUR Workshop Proceedings **3041**, 223–228 (2021), <http://ceur-ws.org/Vol-3041/223-228-paper-41.pdf>
- [169] A. Kazarov, A. Chitan, A. Kazymov, A. Corso-Radu, I. Aleksandrov, I. Soloviev, G. Avolio, M. Vasile, M. Mineev, *The Controls and Configuration Software of the ATLAS Data Acquisition System: evolution towards LHC Run 3*, 25th International Conference on Computing in High Energy and Nuclear Physics (CHEP 2021), EPJ Web of Conferences **251**, 04019 (2021).
- [170] D. Barberis, I. Aleksandrov, E. Alexandrov, Z. Baranowski, L. Canali, E. Cherepanova, G. Dimitrov, A. Favareto, A.F. Casani, E.J. Gallas, C.G. Montoro, S. Gonzalez de la Hoz, J. Hrivnac, A. Iakovlev, A. Kazymov, M. Mineev, F. Prokoshin, G. Rybkin, J. Salt, J. Sanchez, R. Sorokoletov, R. Toebicke, P. Vasileva, M. Villaplana Perez, R. Yuan, *The ATLAS EventIndex: a BigData catalogue for all ATLAS experiment events*, Computing and Software for Big Science **7**, 2 (2023), <https://arxiv.org/pdf/2211.08293.pdf>; <https://doi.org/10.1007/s41781-023-00096-8> [All authors contributed to the development of the EventIndex software and system operations.]
- [171] O.Yu. Derenovskaya, V.V. Ivanov, I.O. Vassiliev, Yu.V. Russov, *Heavy Fragments Identification Using Energy Loss in the STS Detector of the CBM Experiment*, EPJ Web of Conferences **226**, 03005, 4 pp. (2020).
- [172] О.Ю. Дереновская, Т.О. Аблязимов, В.В. Иванов, Ю.В. Руссов, *Регистрация редких распадов  $J/\psi \rightarrow \mu^+ \mu^-$  в эксперименте CBM*, Письма в ЭЧАЯ **17**, 2(227), 219–225 (2020).
- [173] G. Barucca, F. Davi, G. Lancioni, V.V. Uzhinsky, et al., *The potential of hyperon-antihyperon studies with PANDA at FAIR*, 25 pp., Sep 24, 2020, e-Print: arXiv:2009.11582 [hep-ex]
- [174] G. Barucca, V.V. Uzhinsky et al, *Feasibility studies for the measurement of time-like proton electromagnetic form factors from  $p \bar{p} \rightarrow \mu^+ \mu^-$  at PANDA at FAIR*, 23 pp., Jul 1, 2020, e-Print: arXiv:2006.16363 [hep-ex]
- [175] I.A. Kolesnikova, A.V. Nechaevskiy, D.V. Podgainy, A.V. Stadnik, A.I. Streltsov, O.I. Streltsova, *Information system for radiobiological studies*, CEUR Workshop Proceedings **2743**, 1-6-paper-1, 6 pp. (2020), <https://ceur-ws.org/Vol-2743/1-6-paper-1.pdf>
- [176] A.I. Anikina, D.V. Podgainy, A.V. Stadnik, O.I. Streltsova, I.A. Kolesnikova, Yu.S. Severiukhin, D.A. Savvateev, *Application of a neural network approach to the task of arena marking for the “Open Field” behavioral test*, PoS, SISSA **429**, 017, 8 pp. (2022), DOI: <https://doi.org/10.22323/1.429.0017>, <https://pos.sissa.it/429/017/>
- [177] A.G. Soloviev, T.M. Solovieva, A.I. Kuklin, *PROGRAM LIBRARY JINRLIB, SAS – package for small-angle neutron scattering data treatment* (major upgrades during November 2020), <https://gitlab-hybrilit.jinr.ru/yumo-updates/sas>  
<https://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sas/indexe.html>
- [178] A.G. Soloviev, T.M. Solovieva, *FITTER WEB JINRLIB, a program for fitting experimental data obtained on a small-angle neutron scattering spectrometer*, available at GitLab: <https://git.jinr.ru/yumo/fitter-next>
- [179] A. G. Soloviev, T. M. Solovjeva, M. Balaşoiu, A. I. Kuklin, *Development of a Web Application for Fitting the Data of a Small-Angle Neutron Scattering Spectrometer*, Communication at the Conference Parallel Computational Technologies (PCT) 2023, March 28–30, 2023, ITMO Univ., St.-Petersburg, Russia.
- [180] A.V. Avrorin, A.D. Avrorin, A.G. Solov'ev, et al., *Calibrating the Measuring Channels of the Baikal-GVD Neutrino Telescope*, Instrum. Exp. Tech. **63**, 551–560 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1134/S0020441220040107>
- [181] O. Suvorova, A.D. Avrorin, A.G. Solovjev, et al, *Recent progress of the Baikal-GVD project*, PoS **364** (2020), <https://pos.sissa.it/364/050/>

[182] A.D. Avrorin, A.G. Solovjev, et al, *Эксперимент Baikal-GVD*, Ядерная Физика **83**, 6, 511–517 (2020).

[183] A.D. Avrorin, ..., G. Safronov, ..., A.G. Solovjev, et al., *Baikal-GVD: status and first results*, PoS, SISSA **390**, 606, 6 pp. (2020), [PoS\(ICHEP2020\)606](https://pos.sissa.it/archive/conferences/2020/0606)

[184] Baikal-GVD Collaboration, *Deep-Underwater Cherenkov Detector in Lake Baikal*, JETP **134**, 4, 399–416 (2022).

[185] V.B. Zlokazov, *Nonparametric Tests for Purity of Low Statistics Data*, EPJ Web of Conferences **226**, 03016, 4 pp. (2020), DOI: <https://doi.org/10.1051/epiconf/202022603016>

[186] Yu.Ts. Oganessian, V.K. Utyonkov, N.D. Kovrizhnykh, F.Sh. Abdullin, S.N. Dmitriev, D. Ibadullayev, M.G. Itkis, D.A. Kuznetsov, O.V. Petrushkin, A.V. Podshibiakin, A.N. Polyakov, A.G. Popeko, R.N. Sagaidak, L. Schlattauer, I.V. Shirokovski†, V.D. Shubin, M.V. Shumeiko, D.I. Solovyev, Yu.S. Tsyganov, A.A. Voinov, V.G. Subbotin, A.Yu. Bodrov, A.V. Sabel'nikov, A.V. Khalkin, V.B. Zlokazov, K.P. Rykaczewski, T.T. King, J.B. Roberto, N.T. Brewer, R.K. Grzywacz, Z.G. Gan, Z.Y. Zhang, M.H. Huang, H.B. Yang, *First experiment at the Super Heavy Element Factory: High cross section of  $^{288}\text{Mc}$  in the  $^{243}\text{Am} + ^{48}\text{Ca}$  reaction and identification of the new isotope  $^{264}\text{Lr}$* , Phys. Rev. C **106**, L031301 (2022).

[187] B. Erdemchimeg, A.G. Artukh, S. Davaa, B.M. Hue, T. Isataev, S.A. Klygin, G.A. Kononenko, G. Khuukhenkhuu, S.M. Lukyanov, T.I. Mikhailova, V.A. Maslov, K. Mendibaev, Yu.M. Sereda, Yu.E. Penionzhkevich, A. Vorontsov, *Total reaction cross sections of neutron-rich light nuclei measured by the COMBAS*, Proceedings of International Symposium on Exotic Nuclei (World Scientific, Singapore), 41–44 (2020).

[188] B. Erdemchimeg, A.G. Artukh, S.A. Klygin, G.A. Kononenko, Yu.M. Sereda, A.N. Vorontsov, T.I. Mikhailova, *Analysis of velocity distributions in projectile fragmentation reactions of  $^{18}\text{O}$  ions on  $^9\text{Be}$  and  $^{181}\text{Ta}$  targets at 35 A MeV*, Journal of Physics: Conference Series **1690**, 012033, 4 pp. (2020).

[189] B. Erdemchimeg, A.G. Artukh, S.A. Klygin, G.A. Kononenko, Yu.M. Sereda, A.N. Vorontsov, T.I. Mikhailova, *Isotope and Velocity Distributions in Projectile Fragmentation Reactions at Fermi Energies*, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics **85**, 12, 1457–1465 (2021).

[190] B. Erdemchimeg, A.G. Artukh†, S.A. Klygin, G.A. Kononenko, T.I. Mikhailova, Yu.M. Sereda, A.N. Vorontsov, *Investigation of Production of Forward-Angle Fragments in the  $^{22}\text{Ne} + \text{Be/Ta}(42 \text{ MeV/Nucleon})$  Nuclear Reactions*, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics **86**, 11, 1400–1405 (2022).

[191] B. Erdemchimeg, S.A. Klygin, G.A. Kononenko, T.I. Mikhailova, Yu.M. Sereda, A.N. Vorontsov, *Some regularities in the forward angle yields of isotopes with  $8 < Z < 20$  in the reaction of  $^{40}\text{Ar}$  (36.5 A MeV) with  $^9\text{Be}$* , Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics **87**, (2023) (In print).

[192] Yu.E. Titarenko, ..., S.I. Tyutyunnikov, A.A. Baldin, A.N. Sosnin, M.I. Baznat, et al.,  $^{208,207,206,\text{nat}}\text{Pb}(p,x)^{207}\text{Bi}$  and  $^{209}\text{Bi}(p,x)^{207}\text{Bi}$  excitation functions in the energy range of 0.04–2.6 GeV, Nuclear Inst. and Methods in Physics Research A **984**, 164635, 1–80 (2020).

[193] D.V. Podgainy, Суперкомпьютер «Говорун» для задач ОИЯИ, Семинар, посвященный 90-летию со дня рождения Н.Н. Говоруна, Sept. 16, 2020, <https://indico-hlit.jinr.ru/e/govorun>

[194] М. Зуев, Суперкомпьютер «Говорун» для задач ОИЯИ, доклад на внеочередной семинар ОМУС, March 22, 2023, <https://disk.jinr.ru/index.php/s/PB9trmtdXK3M9jx>

[195] D.V. Podgainy, “Govorun” supercomputer for the NICA megascience project, Conference “RFBR grants for NICA”, Oct. 20–23, 2020.

[https://indico.jinr.ru/event/1469/contributions/9911/attachments/8227/12283/Podgainy\\_RFBR\\_2020\\_2.pdf](https://indico.jinr.ru/event/1469/contributions/9911/attachments/8227/12283/Podgainy_RFBR_2020_2.pdf) , <https://indico.jinr.ru/event/1469/>

[196] Yu.L. Kalinovsky, A. Ayriyan, J. Busa, D. Blaschke, A.V. Friesen, A. Khvorostukhin, A.E. Radzhabov, *Investigation of the properties of nuclear matter under conditions of extreme temperatures and densities attainable at the energies of the NICA accelerator complex*, Conference “RFBR grants for NICA”, Oct. 20–23, 2020.

<https://indico.jinr.ru/event/1469/contributions/9897/>

[197] G. Musulmanbekov, V. Zhezher, *New Monte-Carlo generator of heavy ion collisions DCM-SMM and its usage for NICA mega project*, Conference “RFBR grants for NICA”, Oct. 20–23, 2020, <https://indico.jinr.ru/event/1469/contributions/10247/>

[198] А.В. Стадник, А.И. Стрельцов, О.И. Стрельцова, *Алгоритмы на базе нейросетевого подхода для сегментации изображений при исследовании морфофункциональных изменений ЦНС*, Proceedings of the Information System for the Tasks of Radiation Biology Workshop (ISRB2020) Dubna, Russia, June 18, 2020, pp. 39–47.

[199] Yu.A. Butenko, D.M. Marov, A.V. Nechaevskiy, D.V. Podgainy, *Development of a service for conducting radiobiological studies on the Hybrilit Platform*, Proceedings of the Information System for the Tasks of Radiation Biology Workshop (ISRB2020) Dubna, Russia, June 18, 2020, pp. 26–33.

[200] Ю.А. Бутенко, Д.М. Маров, А.В. Нечаевский, О.И. Стрельцова, И.П. Рахмонов, М.В. Башашин, *Разработка виртуальной исследовательской среды для моделирования на платформе HybrILIT физических процессов в системах, основанных на джозефсоновских переходах*, Современные информационные технологии и ИТ-образование **16**, 3, 633–642 (2020), DOI: <https://www.doi.org/10.25559/SITITO.16.202003.633-642>

<http://sitito.cs.msu.ru/index.php/SITITO/article/view/670/713>

[201] Yu. Butenko, M. Ćosić, A. Nechaevskiy, D. Podgainy, I. Rahmonov, A. Stadnik, O. Streltsova, M. Zuev, *ML/DL/HPC Ecosystem of the HybrILIT Heterogeneous Platform (MLIT JINR): New Opportunities for Applied Research*, PoS, SISSA **429**, 027 (2022).

<https://pos.sissa.it/429/027/pdf>

[202] A.R. Rahmonova, A.S. Vorontsov, A.V. Nechaevskiy, I.R. Rahmonov, M.V. Bashashin, M.I. Zuev, O.I. Streltsova, Y.A. Butenko, *Welcome to HLIT Jupyter Book* (in Russian),

<http://studhub.jinr.ru:8080/books/intro.html> Electronic publication: [Семинар: инструментарий на Python для решения научных и прикладных задач](#)

[203] P. Goncharov, E. Shchavalev, G. Ososkov, D. Baranov, *BM@N Tracking with Novel Deep Learning Methods*, EPJ Web of Conferences **226**, 03009, 4 pp. (2020).

[204] Г.А. Ососков, О.В. Бакина, Д.А. Баранов, П.В. Гончаров, И.И. Денисенко, А.С. Жемчугов, Ю.А. Неведов, А.В. Нечаевский, А.Н. Никольская, Е.М. Щавелев, Л. Ван, Ш. Сунь, Я. Чжан, *Нейросетевая реконструкция треков частиц для внутреннего CGEM детектора эксперимента BES-III*, Компьютерные исследования и моделирование **12**, 6, 1361–1382 (2020); O. Bakina, D. Baranov, P. Goncharov, I. Denisenko, A. Zhemchugov, Y. Nefedov, A. Nechaevskiy, A. Nikolskaya, G. Ososkov, E. Shchavalev, L. L. Wang, S. S. Sun, Y. Zhang, *Tracking on the BESIII CGEM inner detector using deep learning*, Computer Research and Modeling **12**, 6, 1361–1381 (2020).

[205] O. Bakina, I. Denisenko, P. Goncharov, Yu. Nefedov, A. Nikolskaya, G. Ososkov, E. Shchavalev, A. Zhemchugov, *Global strategy of tracking on the basis of graph neural network for BES-III CGEM inner detector*, AIP Conference Proceedings **2377**, 060001 (2021),

<https://doi.org/10.1063/5.0066781> ;

[206] A. Nikolskaia, E. Schavalev, P. Goncharov, G. Ososkov, Yu. Nefedov, A. Zhemchugov, I. Denisenko, *Local strategy of particle tracking with TrackNETv2 on the BES-III CGEM inner detector*, AIP Conference Proceedings **2377**, 060004 (2021), <https://doi.org/10.1063/5.0063993>

- [207] E. Rezvaya, P. Goncharov, E. Schavelev, I. Denisenko, G. Ososkov, A. Zhemchugov, *The LOOT model for primary vertex finding in the BES-III inner tracking detector*, AIP Conference Proceedings **2377**, 060005 (2021), <https://doi.org/10.1063/5.0063499>
- [208] D.I. Rusov, A.N. Nikolskaia, P.V. Goncharov, E. M. Shchavelev, G.A. Ososkov, *Deep neural network applications for particle tracking at the BM@N and SPD experiments*, PoS, SISSA **429**, 005 (2022).
- [209] P. Goncharov, A. Uzhinskiy, G. Ososkov, A. Nechaevskiy, J. Zudikhina, *Deep Siamese Networks for Plant Disease Detection*, EPJ Web of Conferences **226**, 03009, 4 pp. (2020), DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022603010>
- [210] A.V. Uzhinskiy, G.A. Ososkov, P.V. Goncharov, A.V. Nechaevskiy, A.A. Smetanin, *One-shot learning with triplet loss for vegetation classification tasks*, Computer Optics **45**, 4, 608–614 (2021), <https://www.doi.org/10.18287/2412-6179-CO-856>
- [211] A. Uzhinskiy, K. Vergel, *Central Russia heavy metal contamination model based on satellite imagery and machine learning*, Computer Optics **47**, 1, 137–151 (2023), DOI: <https://www.doi.org/10.18287/2412-6179-CO-1149>
- [212] G.A. Ososkov, Yu.V. Pyatkov, M.O. Rudenko, *Simulation and Analysis of the Properties of Linear Structures in the Mass Distribution of Nuclear Reaction Products by Machine Learning Methods*, Physics of Particles and Nuclei Letters **18**, 559–569 (2021), <https://link.springer.com/article/10.1134/S1547477121050083>
- [213] J. Sebo, J. Busa Jr., *Comparison of Advanced Methods for Picking Path Optimization: Case Study of Dual-Zone Warehouse*, International Journal of Simulation Modelling **19**, 3, 410–421 (2020), <https://doi.org/10.2507/IJSIMM19-3-521>
- [214] V. Korenkov, A. Nechaevskiy, G. Ososkov, D. Priakhina, V. Trofimov, *A Probabilistic Approach to the Simulation of Data Processing Centers*, EPJ Web of Conferences **226**, 03012 (2020); <http://doi.org/10.1051/epjconf/202022603012>
- [215] D. Priakhina, V. Trofimov, G. Ososkov, K. Gertsenberger, *First results of applying a probabilistic approach to simulation of BM@N data centers*, 6th Collaboration Meeting of the BM@N Experiment at the NICA Facility, Oct. 26, 2020.
- [216] M. Kircher, F. Trinter, S. Grundmann, I. Vela-Perez, S. Brennecke, N. Eicke, J. Rist, S. Eckart, S. Houamer, O. Chuluunbaatar, Yu.V. Popov, I.P. Volobuev, K. Bagschik, M.N. Piancastelli, M. Lein, T. Jahnke, M.S. Schoeffler, R. Doerner, *Kinematically complete experimental study of Compton scattering at helium atoms near the threshold*, Nature Physics **16**, 4, (2020), <https://doi.org/10.1038/s41567-020-0880-2>
- [217] S. Houamer, O. Chuluunbaatar, I.P. Volobuev, Yu.V. Popov, *Compton ionization of hydrogen atom near threshold by photons in the energy range of a few keV: Nonrelativistic approach*, European Physical Journal D: Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics **74**, 4, 81(1)–81(9), 2020, <https://doi.org/10.1140/epjd/e2020-100572-1>
- [218] O. Chuluunbaatar, S. Houamer, Yu. V. Popov, I.P. Volobuev, M. Kircher, R. Dorner, *Compton ionization of atoms as a method of dynamical spectroscopy*, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer **272**, 107820-1–8 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107820> ]
- [219] P.W. Wen, C.J. Lin, R.G. Nazmitdinov, S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, A.K. Nasirov, H.M. Jia, A. Gózdź, *Potential roots of the deep subbarrier heavy-ion fusion hindrance phenomenon within the sudden approximation approach*, Phys. Rev. C **103**, 054601-1–6 (2021), <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.054601>
- [220] O. Chuluunbaatar, B.B. Joulakian, G. Chuluunbaatar, J. Busa Jr., G.O. Koshcheev, *Accurate calculations for the Dirac electron in the field of two-center Coulomb field: Application to heavy ions*, Chem. Phys. Lett. **784**, 139099-1–9 (2021),

<https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.139099>

[221] O. Chuluunbaatar, S. Houamer, Yu.V. Popov, I.P. Volobuev, M. Kircher, R. Dorner, *Compton double ionization of the helium atom: Can it be a method of dynamical spectroscopy of ground state electron correlation?*, J. Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer **278**, 108020–1–9 (2022).

[222] M. Kircher, F. Trinter, S. Grundmann, G. Kastirke, M. Weller, I. Vela-Perez, A. Khan, C. Janke, M. Waitz, S. Zeller, T. Mletzko, D. Kirchner, V. Honkimaki, S. Houamer, O. Chuluunbaatar, Yu.V. Popov, I.P. Volobuev, M.S. Schoffler, L.Ph.H. Schmidt, T. Jahnke, R. Dorner, *Ion and Electron Momentum Distributions from Single and Double Ionization of Helium Induced by Compton Scattering*, Phys. Rev. Lett. **128**, 053001-1–6 (2022),

<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.128.053001>

[223] O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, A.G. Abrashkevich, P.W. Wen, C.J. Lin, *KANTBP 3.1: A program for computing energy levels, reflection and transmission matrices, and corresponding wave functions in the coupled-channel and adiabatic approaches*, Comput. Phys. Commun. **278**, 108397-1–14 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2022.108397>

[224] [G. Chuluunbaatar, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, *PI-type fully symmetric quadrature rules on the 3-, ..., 6-simplexes*, Computers & Mathematics with Applications **124**, 89–97 (2022), <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2022.08.016>

[225] G. Chuluunbaatar, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, [PROGRAM LIBRARY JINRLIB INQSIM](#) – a program for converting PI-type fully symmetric quadrature rules on 2-,..., 6-simplexes from compact to expanded forms (May 05, 2022),

<https://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrilib/inqsim/indexe.html>

[226] M. Mohyl'na, J. Busa Jr., M. Zukovic, *Formation and growth of skyrmion crystal phase in a frustrated Heisenberg antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interaction*, Journal of magnetism and magnetic materials **527**, 167755-1–11 (2021),

<https://doi.org/10.1016/j.immm.2021.167755>

[227] M. Bashashin, E. Zemlyanaya, K. Lukyanov, *Double-Folding Nucleus-Nucleus Optical Potential: Parallel MPI and OpenMP Implementations*, EPJ Web of Conferences **226**, 02004, 4 pp. (2020), DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602004>

[228] M. Kakenov, E.V. Zemlyanaya, V.I. Kukul'in, V.N. Pomerantsev, O. Bayakhmetov, *OpenMP Implementation of Dibaryon-Induced Three-Body Force Potential Calculation*, Physics of Particles and Nuclei Letters **19**, 5, 574–576 (2022).

[229] A.V. Volokhova, [PROGRAM LIBRARY JINRLIB Split](#) – a parallel implementation of the numerical solution of a system of algebraic equations with a tridiagonal matrix using the partition algorithm and the MPI technique, April 27, 2020,

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrilib/split/index.html> (in Russian),

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrilib/split/indexe.html> (in English)

[230] A.V. Volokhova, [PROGRAM LIBRARY JINRLIB RK4-MPI](#) – a parallel implementation of the numerical solution of the Cauchy problem by the 4-order Runge-Kutta method using MPI technology, <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrilib/rk4-mpi/indexe.html>

[231] S. Panayotova, M. Bashashin, E. Zemlyanaya, P. Atanasova, Yu. Shukrinov, I. Rahmonov, *Parallel Numerical Simulation of the Magnetic Moment Reversal within the  $\phi_0$ -Josephson Junction Spintronic Model*, EPJ Web of Conferences **226**, 02018, 4 pp. (2020),

DOI: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602018>

[232] P.Kh. Atanasova, S.A. Panayotova, *Numerical analysis of stabilization time in perturbed Josephson junction from type superconductor-ferromagnetic-superconductor*, Труды XXIV Международного симпозиума «Нанозифика и наноэлектроника» **1**, 7–8 (2020), Изд.: Нижегородский гос. ун-т, ISBN 978-5-91326-587-6.



[233] M.V. Bashashin, E.V. Zemlyanaya, *Comparative Performance Analysis of MPI- and OpenMP Programs on the Example of Parallel Calculations in the Framework of the Nucleus-Nucleus Potential Model and the  $\varphi_0$ -Spintronic Model*, Modern Information Technologies and IT-Education **18**, 3, 545–557 (2022) (in Russian),

<https://doi.org/10.25559/SITITO.18.202203.545-557>

[234] M. Bashashin, E. Zemlyanaya, I. Rahmonov, *Parallel simulation of the magnetic moment reversal within the  $\varphi_0$ -Josephson junction model*, Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei Letters, Направлена в журнал, 2022.

[235] С.И. Сердюкова, *Моделирование динамических процессов в длинных джозефсоновских переходах. Проблема вычисления вольт-амперных характеристик. Оценки скорости роста ошибок округления для разностной схемы второго порядка точности*, ЖВМ и МФ **60**, 1, 159–166, (2020). English translation: S.I. Serdyukova, *Simulation of Dynamical Processes in Long Josephson Junctions: Computation of Current-Voltage Characteristics and Round-error Growth Estimation for a Second-Order Difference Scheme*, Comp. Math. and Math Phys. **60**, 1, 171–178 (2020).

[236] М.И. Зуев, С.И. Сердюкова, *Моделирование динамических процессов в длинных джозефсоновских переходах. Проблема вычисления ВАХ. Численный метод оценки скорости роста ошибок округления*, ЖВМ и МФ, **62**, 1, 3–11 (2022).

[237] М.И. Зуев, С.И. Сердюкова, *Численный метод оценки скорости роста ошибок округления в равномерной метрике*, ЖВМ и МФ, accepted for publication, March 2023.

[238] J. Broulím, A. Ayriyan, H. Grigorian, *Genetic Optimization of LDPC Codes to Improve the Correction of Burst Errors*, EPJ Web of Conf. **226**, 02006, 4 pp. (2020),

<https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602006>

[239] И. Кадочников, *Платформа для потоковой и пакетной обработки Больших данных на примере анализа сетевого трафика*, Семинар, посвященный 90-летию со дня рождения Н.Н. Говоруна, Sept. 16, 2020, <https://indico-hlit.iinr.ru/e/govorun>

[240] С.Д. Белов, *Обзор методов интеллектуальной обработки текстов в социально-экономических приложениях*, Семинар, посвященный 90-летию со дня рождения Н.Н. Говоруна, Sept. 16, 2020, <https://indico-hlit.iinr.ru/e/govorun>

[241] M. Belov, V. Korenkov, N. Tokareva, E. Cheremisina, *Architecture of a compact Data Grid cluster for teaching modern methods of Data Mining in the Virtual Computer Lab*, EPJ Web of Conferences **226**, 03004 (2020), DOI: 10.1051/epjconf/202022603004

[242] S.D. Belov, I.A. Filozova, Y.E. Gavrilenko, A.V. Ilina, J.N. Javadzade, I.S. Kadochnikov, V.V. Korenkov, I.S. Pelevanyuk, D.I. Priakhina, R.N. Semenov, V.A. Tarabrin, P.V. Zrellov, *Methods and algorithms of the analytical platform for analyzing the labor market and the compliance of the higher education system with market needs* PoS, SISSA **429**, 028 (2022), <https://pos.sissa.it/429/028/pdf>

[243] D.A. Lyakhov, V.P. Gerdt, D. Michels, *On the Algorithmic Linearizability for Nonlinear Ordinary Differential Equations*, Journal of Symbolic Computation **98**, 3–22 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsc.2019.07.004>

[244] A. Deveikis, A.A. Gusev, V.P. Gerdt, S.I. Vinitzky, A. Gózdź, A. Pedrak, C. Burdik, G. Pogosyan, *Symbolic-Numerical Algorithm for Computing Orthonormal Basis of  $O(5) \times SU(1,1)$  Group*, LNCS **12291**, 206–227 (2020), <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e03225>

[245] R. Bradford, J.H. Davenport, M. England, H. Errami, V. Gerdt, D. Grigoriev, Ch. Hoyt, M. Kosta, O. Radulescu, T. Sturm, A. Weber, *Identifying the Parametric Occurrence of Multiple Steady States for Biological Networks*, Journal of Symbolic Computation **98**, 84–119 (2020), DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jsc.2019.07.008> Data supporting the research in this paper is freely available in a Zenodo repository: <https://doi.org/10.5281/zenodo.2560661>

[246] V.V. Korniyak, *An Algorithm for Constructing Irreducible Decompositions of Permutation Representations of Wreath Products of Finite Groups*, Journal of Mathematical Sciences **251**, 3, 375–394 (2020), <https://rdcu.be/b9vAW>

[247] В.В. Корняк, *Алгоритм построения неприводимых разложений перестановочных представлений сплетений конечных групп*, Записки научных семинаров ПОМИ, 33 pp. (2020).

[248] В.В. Корняк, *Вычисление неприводимых разложений перестановочных представлений сплетений конечных групп*, ЖВМ и МФ **60**, 1, 96–108 (2020), V.V.Korniyak, *Computation of Irreducible Decompositions of Permutation Representations of Wreath Products of Finite Groups*, Comput. Math. and Math. Phys. **60**, 1, 90–101 (2020), <https://doi.org/10.1134/S0965542520010108>

[249] V.V. Korniyak, *Multipartite Quantum Systems and Representations of Wreath Products*, EPJ Web of Conferences **226**, 02013, 4 pp. (2020), <https://doi.org/10.1051/epjconf/202022602013>

[250] O.V. Tarasov, *Anomalous dimensions of quark masses in the three-loop approximation*, Physics of Particles and Nuclei Letters **17**, 109–115 (2020).

[251] Д.А. Янович, *Вычисление инволютивных базисов и базисов Грёбнера используя табличное представление полиномов*, Программирование, 2, 67–72 (2020); English translation: V.A. Yanovich, *Computation of Involutive and Gröbner Bases Using the Tableau Representation of Polynomials*, Programming and Computer Software **46**, 2, 162–166 (2020).

[252] Yu. Paliy, *Parametrization of the conjugacy class of the special linear group*, Journal of Mathematical Sciences **251**, 3, 405–418 (2020).

[253] V.V. Korniyak, *Dynamic Simulation of Quantum Entanglement in Finite Quantum Mechanics. A Computer Algebra Approach*, Programming and Computer Software **47**, 2, 124–132 (2021), В.В. Корняк, *Моделирование динамики квантовой запутанности в конечной квантовой механике: компьютерно-алгебраический подход*, Программирование, 2, 34–43 (2021).

[254] V.V. Korniyak, *Emergence of geometry in quantum mechanics based on finite groups*, International Conf. Polynomial Computer Algebra '2020, Oct. 12–17, 2020, Euler International Math. Institute, St. Petersburg, Russia,

<https://pca-pdmi.ru/2020/files/46/KorniyakSPB2020Slides.pdf>,  
<https://pca-pdmi.ru/2020/files/46/KorniyakPCA2020AbstractBW.pdf>,  
<https://pca-pdmi.ru/2020/program>

[255] V. Abgaryan, A. Khvedelidze, A. Torosyan, *The global indicator of classicality of an arbitrary N-level quantum system*, Journal of Mathematical Sciences **251**, 3, 301 (2020).

[256] N. Abbasli, V. Abgaryan, M. Bures, A. Khvedelidze, I. Rogojin, A. Torosyan, *On Measures of Classicality/Quantumness in Quasiprobability Representations of Finite-Dimensional Quantum Systems*, Physics of Particles and Nuclei **51**, 4, 443 (2020).

[257] V. Abgaryan, A. Khvedelidze, I. Rogojin, *On Overall Measure of Non-classicality of N-level Quantum System and Its Universality in the Large N Limit*, Lecture Notes in Computer Science **12563**, 244–255 (2021) [https://doi.org/10.1007/978-3-030-66471-8\\_20](https://doi.org/10.1007/978-3-030-66471-8_20)

[258] V. Abgaryan, A. Khvedelidze, A. Torosyan, *Kenfack–Zyczkowski indicator of nonclassicality for two non-equivalent representations of Wigner function of qutrit*, Physics Letters A **412**, 7, 127591 (2021), <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127591>;

[259] V. Abgaryan, A. Khvedelidze, *On Families of Wigner Functions for N-Level Quantum Systems*, Symmetry **13**, 6, 1013, 21 pp. (2021), <https://doi.org/10.3390/sym13061013>

[260] A. Khvedelidze, A. Torosyan, *Comparing classicality of qutrits from Hilbert-Schmidt, Bures and Bogoliubov-Kubo-Mori ensembles*, Zap. Nauchn. Sem. POMI **517**, 250–267 (2022).

[261] K.K. Sharma, V.P. Gerdt, *Entanglement Sudden Death and Birth Effects in Two Qubits Maximally Entangled Mixed States under Quantum Channels*, International Journal of Theoretical Physics **59**, 403–414 (2020), <https://doi.org/10.1007/s10773-019-04332-z>

[262] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Hartree-Fock-Bogolubov method in the theory of Bose-condensed system*, Physics of Particles and Nuclei **51**, 823–828 (2020),

DOI: <https://doi.org/10.1134/S1063779620040772>

[263] V.I. Yukalov, A.N. Novikov, E.P. Yukalova, V.S. Bagnato, *Characteristic quantities for nonequilibrium Bose systems*, J. Phys. Conf. Ser. **1508**, 012006-8 (2020).

[264] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, D. Sornette, *Role of collective information in networks of quantum operating agents*, Physica A **598**, 127365-24 (2022).

[265] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Self-excited waves in complex social systems*, Physica D **433**, 133188-12 (2022).

[266] П.В. Зрелов, О.В. Иванцова, В.В. Кореньков, Н.В. Рябов, С.В. Ульянов, *Эффективное моделирование квантовых алгоритмов на симуляторах классической архитектуры*, Сист. анализ в науке и образовании, 1, 42–54 (2022),

<https://sanse.uni-dubna.ru/index.php/sanse/article/view/519/471>

[267] П.В. Зрелов, О.В. Иванцова, В.В. Кореньков, Н.В. Рябов, С.В. Ульянов, *Оценка возможностей классических компьютеров при реализации симуляторов квантовых алгоритмов*, Программные продукты и системы **35**, 4, 618–630 (2022),

DOI: <https://doi.org/10.15827/0236-235X.140.618-630>

[268] А.В. Бутенко, П.В. Зрелов, В.В. Кореньков, С.А. Костромин, Д.Н. Никифоров, А.Г. Решетников, С.В. Семашко, Г.В. Трубников, С.В. Ульянов, *Интеллектуальная система дистанционного управления давлением и расходом жидкого азота в криогенной системе сверхпроводящих магнитов: программно-аппаратная платформа*, Письма в ЭЧАЯ **20**, 2(247), 183–199 (2023).

[269] V.V. Korenkov, A.G. Reshetnikov, S.V. Ulyanov, P.V. Zrelov, D.P. Zrelova, *Self-organized intelligent quantum controller: quantum deep learning and quantum genetic algorithm – QSCOptKB™ toolkit*, PoS, SISSA **429**, 012 (2022), <https://pos.sissa.it/429/012/pdf>

[270] М.В. Башашин, Е.В. Земляная, О.И. Стрельцова. *Основы технологии OpenMP на кластере HybriLIT*, Учебное пособие, ISBN 978-5-89847-598-7, 50 с., Унив. “Дубна”, 2020

[271] <https://indico-hlit.jinr.ru/event/328/>

[272] <https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/>

From the ten lectures delivered by the MLIT staff working in Topic 1119, nine are available at the School web site:

[https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/2002/attachments/581/1038/Podgainy\\_school22.pdf](https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/2002/attachments/581/1038/Podgainy_school22.pdf)

[https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1972/attachments/575/1032/HEPNICA\\_computing\\_2022.pdf](https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1972/attachments/575/1032/HEPNICA_computing_2022.pdf)

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1976/attachments/585/1042/itSchool-Busa.pdf>

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1979/attachments/593/1050/Kalinovsky.pdf>

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1980/>

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1981/attachments/598/1055/DG.pdf>

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1988/attachments/591/1048/pdf>

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1986/attachments/596/1053/pdf>

<https://indico-hlit.jinr.ru/event/329/contributions/1991/attachments/600/1060/--.pdf>