

УТВЕРЖДАЮ

Вице-директор ОИЯИ

_____ / _____

“ _____ ” _____ 202_ г.

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ПРОДЛЕНИЯ
ТЕМЫ ПО НАПРАВЛЕНИЮ ИССЛЕДОВАНИЙ
В ПРОБЛЕМНО-ТЕМАТИЧЕСКОМ ПЛАНЕ ОИЯИ**

1. Общие сведения о теме

1.1. Шифр темы

05-6-1119-2014/...

1.2. Лаборатория

ЛИТ

1.3. Научное направление

Сети, компьютеринг, вычислительная физика

1.4. Наименование темы

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

1.5. Руководители темы

С.В. Шматов,

О. Чулуунбаатар

1.6. Заместители руководителя темы

Н.Н. Войтишин,

П.В. Зрелов

2. Научное обоснование и организационная структура

2.1. Аннотация

Тема направлена на организацию и обеспечение вычислительной, алгоритмической и программной поддержки подготовки и реализации экспериментальных и теоретических исследований, проводимых с участием ОИЯИ, разработку, развитие и использование вычислительных методов для моделирования сложных физических систем, изучаемых в рамках проектов ПТП ОИЯИ. В рамках темы будет осуществляться разработка математических методов и программного обеспечения, в том числе на основе алгоритмов машинного и глубокого обучения с использованием рекуррентных и сверточных нейронных сетей, для моделирования физических процессов и экспериментальных установок, обработки и анализа данных экспериментов в области физики элементарных частиц, ядерной физики, физики нейтрино, радиобиологии и др. Особое внимание будет уделено созданию систем

распределенной обработки и анализа данных экспериментов и информационно-вычислительных платформ поддержки исследований, проводимых в ОИЯИ и других исследовательских центрах.

Основные направления работы – математическая и вычислительная физика для поддержки крупных инфраструктурных проектов ОИЯИ, в первую очередь, флагманский проект ОИЯИ NICA в режиме работы на фиксированной мишени (BM@N) и в режиме коллайдера для столкновений релятивистских тяжелых ионов (MPD) и на поляризованных пучках (SPD), нейтринный телескоп Baikal-GVD. Также будет продолжено сотрудничество с экспериментами в мировых ускорительных центрах (ЦЕРН, BNL и пр.), экспериментами в области физики нейтрино и астрофизических экспериментах, программами радиобиологических исследований. Рассматривается возможность применения разрабатываемых методик и алгоритмов в рамках других проектов.

Главным направлением в моделировании сложных физических систем, включая состояния плотной ядерной материи и квантовые системы, будет разработка методов, комплексов программ и проведение численного исследования на основе решения соответствующих систем нелинейных, пространственно-многомерных интегральных, интегро-дифференциальных или дифференциальных уравнений в частных производных с большим количеством параметров, характеризующихся наличием критических режимов, бифуркаций и фазовых переходов с комплексным применением методов вычислительной физики, квантовой теории информации и гибридных квантово-классических методов программирования.

Также в рамках темы предполагается развитие работ по квантовому интеллектуальному управлению технологическими процессами и физическими установками в ОИЯИ и квантовым вычислениям в квантовой химии и физике.

Кроме того, будет продолжена подготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий в рамках IT-школы.

2.2. Проекты в теме

Проект “Математические методы и программное обеспечение для моделирования, обработки и анализа экспериментальных данных”
руководитель:

С.В. Шматов

заместители руководителя: А.С. Айриян, Н.Н. Войтишин

Проект “Методы вычислительной физики для исследования сложных систем”

руководители: Е.В. Земляная, О. Чулуунбаатар

заместители руководителя: Ю.Л. Калиновский, А. Хведелидзе

Активность “Квантовое интеллектуальное управление технологическими процессами и физическими установками в ОИЯИ и квантовые вычисления в квантовой химии и физике”

руководители: П.В. Зрелов, С.В. Ульянов

Активность “Подготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий”

научный руководитель: В.В. Кореньков

руководители: А.В. Нечаевский, Д.И. Пряхина, О.И. Стрельцова

2.3. Научное обоснование

В соответствии с Семилетним планом развития ОИЯИ на 2024–2030 гг. и Стратегическим планом долгосрочного развития ОИЯИ на период до 2030 г. и далее важным направлением деятельности Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова является обеспечение математической, алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. Целью являются моделирование физических процессов, создание алгоритмов и программных комплексов для обработки и

анализа экспериментальных данных, разработка алгоритмов в области машинного и глубокого обучения, искусственного интеллекта и когнитивной интеллектуальной робототехники, систем квантового интеллектуального управления, развитие методов компьютерной алгебры и квантовых вычислений, а также аналитики Больших данных.

Тема объединяет проекты и активности ОИЯИ в области вычислительной физики, направленные на развитие и использование методов математической физики, разработку основанных на них алгоритмов и создание соответствующего программного обеспечения для проведения исследований, осуществляемых в рамках Программно-тематического плана ОИЯИ в области физики элементарных частиц, ядерной физики, физики нейтрино, физике конденсированных сред, радиобиологии и прикладных исследований. Основные приоритеты исследований ОИЯИ по направлению “Сети, компьютеринг, вычислительная физика” включают:

- развитие алгоритмов на основе рекуррентных и сверточных нейронных сетей для задач машинного и глубокого обучения и аналитики Больших данных, предназначенных в первую очередь для решения различных задач в экспериментах по физике частиц, в том числе для мегапроекта NICA и нейтринных экспериментов;
- создание современных инструментов исследований для международных коллабораций (NICA, нейтринная программа ОИЯИ, эксперименты на LHC);
- разработка масштабируемых алгоритмов и программного обеспечения для обработки многопараметрических, многомерных, иерархических наборов данных эксасбайтного объема;
- развитие информационно-вычислительных систем для анализа и обработки экспериментальных данных в области радиобиологии;
- развитие новых методов математического моделирования и вычислительных подходов, включая квантовые вычисления, для исследований, проводимых в ОИЯИ;
- разработка алгоритмов интеллектуального управления физическими экспериментальными установками ОИЯИ на основе квантового подхода.

I. Математические методы и программное обеспечение для моделирования физических процессов и экспериментальных установок, обработки и анализа экспериментальных данных

Главной целью этого направления темы является проведение научно-исследовательских работ по тематике вычислительной физики для экспериментов физики элементарных частиц, атомного ядра, физике конденсированных сред, в области радиобиологии и прикладных исследований в соответствии с ПТП ОИЯИ. Предусматривается создание и развитие математических методов и соответствующего программного обеспечения, современных инструментов исследований для международных коллабораций (NICA, нейтринная программа ОИЯИ, эксперименты на LHC) и применение созданных методов и алгоритмов в прикладных целях. Основные задачи включают

- проведение разработок и применение современных методов и алгоритмов, предназначенных для моделирования физических процессов и экспериментальных установок;
- проведение разработок и применение современных методов и алгоритмов реконструкции физических объектов, визуализации событий и анализа данных;
- разработка совместно с сотрудниками ОИЯИ и других российских и мировых центров программы исследований экспериментов с целью изучения фундаментальных свойств материи, их подготовка и реализация;
- создание и развитие информационно-вычислительных систем для анализа и обработки экспериментальных данных, участие в организации и проведении обработки экспериментальных данных и анализа физической информации, включая открытые данные мировых экспериментов (Open Data), с использованием ГРИД-технологий и

компьютерных центров распределенных вычислений, в частности Многофункционального информационно-вычислительного комплекса (МИВК) ОИЯИ, включая суперкомпьютер “Говорун”;

- создание современных инструментов исследований для международных коллабораций (NICA, нейтринная программа ОИЯИ, эксперименты на ЛНС), включая программное обеспечение (ПО) для контроля качества данных, характеристик и калибровки экспериментальных комплексов в рамках ПТП ОИЯИ;
- создание и развитие информационно-вычислительных систем для проведения радиационных исследований в науках о жизни;
- применение развитых методов и алгоритмов в прикладных целях.

Основная стратегия – применение общих для различных экспериментов решений и методик при создании программного обеспечения для моделирования, реконструкции и анализа данных. Все разработки должны быть нацелены на реализацию актуальных научно-исследовательских задач экспериментальных программ ОИЯИ, все аналитические или численные вычисления должны осуществляться в рамках физических сценариев, имеющих выход на экспериментальную проверку.

Структура соответствующего проекта включает в себя:

- Моделирование физических процессов и экспериментальных установок:
 - аналитические и численные расчеты физических процессов, оптимизация программного обеспечения, включая настройку и адаптацию физических генераторов событий;
 - проведение массового моделирования и создание баз данных событий;
 - участие в создании компьютерных моделей установок и моделирование сигнала на прохождение через них элементарных частиц на основе GEANT4 (и других) и быстрого моделирования отклика установок.
- Реконструкция физических объектов и анализ данных экспериментов:
 - разработка алгоритмов, в том числе на основе рекуррентных и сверточных нейронных сетей для задач машинного и глубокого обучения, и создание соответствующего ПО для реконструкции физических объектов (треков, частиц, кластеров и т.д.) и физических процессов;
 - разработка методов и алгоритмов для анализа данных, включая разработку методик статистического анализа;
 - адаптация созданного ПО для конкретных экспериментов, осуществление реконструкции и анализа данных экспериментов;
 - проведение анализа открытых данных экспериментов (Open Data), в частности, экспериментов на ЛНС;
 - проведение глобального анализа данных различных экспериментов (в частности, объединенный анализ данных ускорительных и астрофизических экспериментов по поиску кандидатов на роль темной материи).
- Поддержка и развитие программной среды экспериментов
 - поддержка и развитие баз данных;
 - оптимизация структуры данных, разработка методов сбора, обработки и хранения данных для экспериментов на NICA;
 - создание ПО для визуализации событий (моделирование и реальные данные).

II. Методы вычислительной физики для исследования сложных систем

Это направление нацелено на разработку и использование математических и вычислительных методов для моделирования сложных физических систем, изучаемых в рамках проектов ПТП ОИЯИ и описываемых, как правило, системами нелинейных, пространственно-

многомерных интегральных, интегро-дифференциальных или дифференциальных уравнений в частных производных с большим количеством параметров, характеризующихся наличием критических режимов, бифуркаций и фазовых переходов. Математическое моделирование является неотъемлемой частью современных научных исследований и требует высокой квалификации, специальных знаний и опыта для формулировки математической постановки задач в рамках изучаемых моделей, адаптации известных и развития новых численных подходов для эффективного учета особенностей исследуемых физических процессов, разработки алгоритмов и комплексов программ для высокопроизводительного моделирования на современных вычислительных архитектурах, включая ресурсы МИВК. Исследования в рамках проекта будут сосредоточены в следующих основных направлениях:

- разработка методов, комплексов программ и проведение численного исследования взаимодействий различных типов в сложных системах ядерной физики и квантовой механики;
- исследование многофакторных процессов в многопараметрических моделях сложных систем с внешними воздействиями;
- решение задач, возникающих при разработке и оптимизации режимов работы экспериментальных установок;
- моделирование физических явлений на основе уравнения состояния плотной ядерной материи;
- моделирование квантовых систем.

В результате исследований, проведенных с использованием разработанных методов и комплексов программ, будет получена новая фундаментальная информация об изучаемых объектах, необходимая для уточнения и дальнейшего развития теоретических подходов и математических моделей, для планирования экспериментальных проектов.

Исследования проекта тесно связаны с широким спектром научных направлений в рамках Тематического плана ОИЯИ и нацелены на создание новых математических методов, алгоритмов и программ для успешного решения актуальных задач, возникающих в ходе реализации научных программ в ОИЯИ. Исследования в рамках проекта охватывают следующий круг задач

- Разработка методов, комплексов программ и проведение численного исследования сложных ядерно-физических и квантово-механических процессов
 - исследование физических характеристик подбарьерных реакций слияния/деления тяжелых ядер на основе развития метода сильной связи каналов, потенциальных моделей атомных ядер и метода конечных элементов;
 - исследование процессов рассеяния тяжелых ионов и частиц на ядрах и взаимодействия тяжелых ионов в диапазоне средних энергий на основе моделей микроскопического оптического потенциала и в рамках транспортно-статистического подхода;
 - моделирование химических связей и реакций с участием тяжелых и сверхтяжелых элементов с целью интерпретации результатов термохроматографических экспериментов, проводимых в ЛЯР;
 - развитие методов исследования квантово-механических систем применительно к моделированию динамики спиновых ансамблей и холодных атомов в ловушках.
- Исследование многофакторных процессов в моделях сложных систем с внешними воздействиями
 - моделирование физико-химических и структурных изменений в материалах под действием облучения заряженными частицами и лазерного облучения; развитие методов расчета характеристик энергетических потерь тяжелыми ионами в облучаемом материале в широком диапазоне зарядового номера налетающих частиц и их относительных скоростей;
 - моделирование сверхпроводящих процессов в джозефсоновских структурах различного типа; моделирование динамики спиновых систем в наноматериалах для исследования

- перспективы создания элементов памяти и передачи информации;
- исследование структуры и свойств полидисперсных фосфолипидных везикулярных систем различного типа, включая нанолечения, на основе молекулярно-динамических подходов и в рамках метода разделенных формфакторов;
- развитие методов и проведение моделирования сложных процессов в конденсированных средах с диссипацией и внешними воздействиями, описываемых нелинейными уравнениями теории поля.
- Решение задач, возникающих при разработке и оптимизации режимов работы экспериментальных установок
 - развитие методов численного решения систем уравнений, возникающих при моделировании физических полей;
 - разработка и программная реализация алгоритмов, направленных на повышение эффективности и оптимизацию численного моделирования сложных магнитных систем ускорителей;
 - проведение моделирования магнитных систем для экспериментальных установок, включая численное моделирование физических процессов при формировании магнитного поля циклотрона MSC230 (ЛЯП).
- Моделирование физических явлений на основе уравнения состояния плотной ядерной материи:
 - моделирование сложных процессов в астрофизических системах;
 - моделирование процессов в горячей и плотной материи при соударениях тяжелых ионов в диапазоне энергий NICA.
- Разработка новых методов вычислительной физики, основанных на гибридном квантово-классическом программировании компьютерной математики, и их применение для исследования информационных характеристик квантовых состояний в физике элементарных частиц и ядер, квантовой химии и биофизике.

Несмотря на разнообразие заявленных задач, процесс разработки методов и проведения математического моделирования проводится в целом по единой схеме, охватывающей следующие этапы:

- формулировка математической постановки задачи, корректно отражающей основные особенности изучаемой проблемы и цели исследования;
- разработка вычислительного подхода на основе применения методов вычислительной математики, символьно-численных и численно-аналитических алгоритмов, нейросетевых и молекулярно-динамических методов, методов квантовых вычислений и компьютерной алгебры, алгоритмов параллельных вычислений;
- программная реализация разработанной вычислительной схемы с использованием средств программирования высокого и сверхвысокого уровня, технологий для организации параллельных и гибридных вычислений на современных высокопроизводительных вычислительных архитектурах, с привлечением имеющихся библиотек компьютерных программ и проблемно-ориентированных пакетов программ, с применением специализированного инструментария для создания комфортной информационно-вычислительной среды для программирования и проведения расчетов;
- проверка корректности разработанных методов и программ и верификация моделей на основе тестовых расчетов с варьируемыми вычислительными параметрами, сопоставления численных результатов с имеющимися теоретическими и экспериментальными оценками;
- проведение математического моделирования и получение в ходе анализа численных результатов новых знаний о моделируемых физических системах, которые могут служить основой для уточнения и дальнейшего развития теоретических подходов и планов экспериментальных проектов.

Исследования в рамках проекта предполагают оригинальные разработки и

совершенствование существующих, в том числе созданных участниками проекта, методов на каждом из перечисленных этапов. Тем самым, в ходе реализации проекта будут разработаны новые подходы, необходимые для успешного проведения основополагающих перспективных и опережающих исследований сложных физических явлений, описываемых нелинейными многомерными многопараметрическими системами уравнений. Результатом проекта будут (1) оригинальные разработки в области развития методов вычислительной математики, высокопроизводительных вычислений и математического моделирования и (2) полученные на этой основе новые физически значимые результаты.

III. Квантовое интеллектуальное управление технологическими процессами и физическими установками в ОИЯИ и вычисления в квантовой химии и физике

В рамках отдельной Активности предполагается разработка встраиваемых квантовых самоорганизующихся регуляторов для систем интеллектуального управления технологическими процессами, устройствами и установками ОИЯИ и задач интеллектуальной когнитивной робототехники. Предусматривается создание программного продукта для вычисления электронной и магнитной структур молекулярных комплексов и кристаллических фрагментов новых функциональных материалов с использованием квантовых симуляторов на классических вычислительных архитектурах.

Основной изучаемой проблемой данной активности является эффективное использование технологий интеллектуальных вычислений в задачах робастного управления с целью повышения надежности функционирования физических установок. Решение задач основано на возможности повышения робастности существующих систем управления за счёт встраиваемых баз знаний и перехода в соответствующие интеллектуальные системы управления, которые проектируются и поддерживаются разрабатываемым в проекте программным инструментарием на основе платформы, объединяющей мягкие вычисления и квантовые оптимизаторы баз знаний.

Исследование эффективности квантовых алгоритмов в решении задач квантовой химии и физики новых функциональных материалов. Применение известных квантовых алгоритмов и их развитие будет осуществляться на симуляторах с классической вычислительной архитектурой.

Основными задачами является разработка

- встраиваемых самоорганизующихся регуляторов для систем интеллектуального управления технологическими процессами, устройствами и установками в ОИЯИ (в том числе для случаев непредвиденных и непредсказуемых ситуаций) на основе использования разных типов робототехнических систем;
- верхнего (интеллектуального) уровня управления криогенными системами сверхпроводящих магнитов ускорительного комплекса НИКА;
- платформы искусственного интеллекта на основе квантовых генетических алгоритмов, квантового глубокого обучения и квантовой оптимизации для задач интеллектуального управления;
- разработка и модификация алгоритмов и квантовых схем с реализацией с помощью программных симуляторов на компьютерах классической архитектуры для задач когнитивной робототехники и интеллектуального управления;
- выбор и модификация квантовых алгоритмов с учетом специфики вычислительных задач в исследовании электронной и магнитной структур молекулярных комплексов и кристаллических фрагментов новых функциональных материалов с сильными электронными корреляциями. Проведение вычислений для физико-химических систем с использованием квантовых симуляторов.

IV. Подготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий

В рамках отдельной Активности предполагается проводить подготовку и переподготовку специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий на базе МИВК ОИЯИ и его учебно-образовательных компонент осуществляются в целях:

- повышения квалификации сотрудников ОИЯИ для развития научных проектов, в том числе класса мегасайенс, реализуемых в ОИЯИ или с его участием, а также для создания и поддержки цифровой экосистемы ОИЯИ;
- распространения компетенций в области вычислительной физики и информационных технологий в регионы России и страны-участницы ОИЯИ для увеличения кадрового потенциала ОИЯИ и сотрудничающих с Институтом организаций.

Ожидаемые результаты по завершении темы (к 2026 г.)

- Завершение ревизии генераторов взаимодействий и их развитие для моделирования процессов взаимодействий легких и тяжелых ядер в том числе при энергии NICA
 - ревизия моделей FTF и QGSM и включение разработанных программных модулей моделирования ядерных взаимодействий нестабильных, долгоживущих частиц – очарованных адронов, ботониев, легких гипер-ядер и анти-гипер-ядер после всесторонней проверки и тестирования в пакет Geant4;
 - развитие генератора DCM-QGSM-SMM: учет зависимости времени жизни резонансов от плотности ядерной среды, подавление сечения рождения псевдоскалярных мезонов в плотной ядерной среде, усиление рождения гиперонов в плотной ядерной среде; усиление выхода дилептонов, замена Вудс-Саксоновской модели сталкивающихся ядер на решеточную, что позволит включить деформацию ядер;
 - получение однозначной информации о примеси кварковых состояний при энергии NICA как в слабо возбужденном, так и в основном состоянии дейтрона.
- Завершение ревизии генераторов взаимодействий и их развитие для моделирования процессов рождения частиц-кандидатов на роль темной материи, дополнительных хиггсовских бозонов и процессов, идущих с нарушением лептонного числа для условий LHC
 - ревизия пространства модельных параметров ряда моделей темной материи, доступных для изучения на LHC при номинальной энергии и полной интегральной светимости до 350 фбн^{-1} , проведение комплексного моделирования процессов образования частиц темной материи в рамках упрощенных и расширенных хиггсовских моделей;
 - проведение комплексного моделирования процессов, идущих с нарушением лептонного числа, с помощью генераторов QBH, Pythia, MadGraph и др.
- Разработка алгоритмов реконструкции треков заряженных частиц для экспериментальных комплексов, в том числе на NICA и LHC, создание соответствующего программного обеспечения и его применение для обработки и анализа данных, изучения физико-технических характеристик детекторных систем
 - универсальный алгоритм распознавания на базе вейвлет-анализа перекрывающихся сигналов в трекинговых детекторах экспериментов ФВЭ с амплитудным представлением сигнала;
 - оценка загрузки фоновыми частицами и эффекта старения CSC камер эксперимента CMS на различных типах данных и при различных условиях набора данных;
 - оптимизация алгоритма трекинга в DCH эксперимента BM@N для набора данных от взаимодействия тяжелых ионов с мишенью. Автоматизация получения передаточной функции для DCH эксперимента BM@N. Улучшение реконструкции траектории заряженных частиц в CSC детекторах BM@N;
 - разработка и программная реализация методов моделирования и обработки данных, а также их развитие и адаптация для актуальных конфигураций ряда трекинговых детекторов (Forward Silicon, GEM, small CSC, large CSC, Silicon Beam Tracker, Silicon Profilometer.) трековой системы эксперимента BM@N;

- разработка методики и программной реализации системы глобальной юстировки детекторов эксперимента $BM@N$;
- методика идентификации заряженных частиц, в частности, в детекторе MPD, на основе методов машинного обучения, программная реализация разработанных подходов в программной среде обработки и анализа эксперимента $mpdroot$, интеграция современных библиотек машинного и глубокого обучения в программную среду $mpdroot$.
- Создание и развитие системы обработки и анализа данных для экспериментов на ускорительном комплексе ОИЯИ NICA
 - формирование версии пакета $mpdroot$, работающей с четкими правилами поддержки на весь срок эксперимента MPD, с предусмотренными регулярными обновлениями всей рабочей среды (с точки зрения программного обеспечения), и адаптацией ПО под актуальные требования проекта;
 - реализация, методологическое подтверждение, и внедрение в прикладное ПО эксперимента алгоритмов обработки данных с использованием элементов искусственного интеллекта;
 - реализация и введение в эксплуатацию набора систем и сервисов обеспечивающих обработку данных для эксперимента SPD в распределенной гетерогенной вычислительной среде, с поддержкой прогнозируемых нагрузок для своевременной обработки данных на первом этапе работы эксперимента;
 - создание вспомогательных информационных сервисов для экспериментов мегапроекта НИКА ($logbook$, $e-log$, единый графический интерфейс по управлению экспериментом, $information\ service$, реализация интерфейсов по конвертации данных в подсистемах эксперимента ($Control\ system\ to\ condition\ data$ ит.д.), создание специализированных баз данных, систем мониторинга, других сервисов, требующих общей ИТ поддержки.
- Поддержка и развитие программной среды экспериментов на LHC
 - введение в эксплуатацию в RUN4 проекта CREST для эксперимента ATLAS, поддержка эксплуатации $Pickup\ Service$ и мониторинга проекта $EventIndex$ эксперимента ATLAS.
- Развитие системы обработки и анализа данных для реконструкции событий экспериментов в рамках реализации программы ОИЯИ в области физики нейтрино
 - отладка на большом объеме экспериментальных данных системы обработки данных и достижение её работоспособности в качестве основной системы в проекте $BAIKAL-GVD$;
 - развитие программного обеспечения для реконструкции космических лучей и высокоэнергетических гамма-квантов на данных с детекторов TAIGA-HiSCORE и TAIGA-IACT.
- Разработка алгоритмов и программного обеспечения для исследовательских проектов ОИЯИ в области нейтральной физики
 - разработка пакета программ для первичной обработки малоугловых экспериментальных данных спектрометра ЮМО для многодетекторной системы с позиционно-чувствительным детектором с распределенными возможностями сочетания типов обработки, включая нормировки на потоки, адаптации к возможной смене частоты импульсов реактора ИБР-2, методов учета фоновых условий и адаптации к изменениям многодетекторной системы спектрометра ЮМО.
- Разработка алгоритмов, программного обеспечения и информационно-вычислительных платформ для радиобиологических исследований, прикладных исследований в области протонной терапии и экологии
 - создание программного обеспечения для реконструкции треков в прототипе цифрового калориметра для протонной терапии;

- создание информационно-вычислительной системы, обеспечивающей удобную среду для хранения экспериментальных данных, проведения анализа результатов лабораторных радиобиологических исследований, создания наборов данных, разработки и применения алгоритмов, построенных на методах и подходах машинного и глубокого обучения;
 - построение иерархической системы хранения и обработки данных для созданной информационно-вычислительной системы для лабораторных радиобиологических исследований на базе созданной на платформе HybriLIT многоуровневой СХД, работающей по принципу от «горячих» до «холодных» слоев наполнение алгоритмического блока информационно-вычислительной системы для лабораторных радиобиологических исследований тремя основными модулями: модуль для изучения поведенческих паттернов мелких лабораторных животных, подверженных физическому или химическому воздействию, модуль для гистологических исследований и модуль для статистического комплексного анализа биологических данных;
 - будет реализована интеллектуальная платформа определения состояния сельскохозяйственных и декоративных растений, в которой представлен значительный объем определяемых болезней, представлены подробные планы лечения и используются передовые технологии искусственного интеллекта;
 - платформа контроля и прогнозирования состояния окружающей среды, сочетающая в себе передовые технологии управления данными и искусственного интеллекта для решения задач экологического мониторинга.
- Разработка методов, комплексов программ и проведение численного исследования взаимодействий различных типов в сложных системах ядерной физики и квантовой механики
 - разработка метода, комплекса программ и расчет с их помощью сечений глубоко подбарьерных реакций слияния\деления тяжелых ядер в условиях сильной связи каналов на основе численного решения соответствующей системы уравнений Шредингера с асимптотическими граничными условиями;
 - исследование структуры легких и тяжелых ядер с нейтронным гало на основе расчета характеристик ядро-ядерных и протон-ядерных взаимодействий в рамках модифицированной модели микроскопического оптического потенциала;
 - создание пакета программ для реалистичного описания изотопных и скоростных распределений реакций фрагментации тяжелых ионов при средних энергиях в рамках транспортно-статистического подхода;
 - построение и программная реализация стохастической модели, обеспечивающей количественное описание химических реакций с участием тяжелых и сверхтяжелых элементов в хроматографических экспериментах ЛЯР;
 - численное исследование динамики спиновых систем и холодных атомов в ловушках в рамках квантово-механической модели на основе решения системы нелинейных уравнений с использованием оптимизированного метода автомодельных приближений.
 - Исследование многофакторных процессов в многопараметрических моделях сложных систем с внешними воздействиями
 - разработка вычислительных схем и комплексов программ, реализующих решение систем уравнений в рамках континуально-атомистических моделей взаимодействия облучающего пучка заряженных частиц с материалом мишени. Получение методами математического моделирования новой информации о динамике формирования дефектных структур под действием облучения;
 - получение новой информации о формировании, структуре и свойствах фосфолипидных объектов различного типа (везикул, бицелл) методами классической и квантовой молекулярной динамики и на основе метода разделенных формфакторов. В том числе,

- моделирование взаимодействия бета-амилоидных и антимикробных пептидов с системой фосфолипидных мембран;
- исследование сложных процессов в джозефсоновских и спиновых наноструктурах в зависимости от конфигурации изучаемых систем и характера внешних воздействий с целью оценки влияния различных факторов на физические характеристики и динамику сверхпроводящих процессов;
 - разработка и использование информационно-вычислительной среды на базе JupyterHub для комфортной и унифицированной работы с моделями сверхпроводящих структур.
 - разработка методов и исследование процессов формирования и свойств локализованных структур в конденсированных средах, описываемых различными типами нелинейных уравнений теории поля. Моделирование гидратации электрона в рамках динамической модели полярона, модифицированной для исследования влияния различных факторов на этот процесс.
- Решение задач, возникающих при разработке и оптимизации режимов работы экспериментальных установок;
 - разработка, программная реализация и тестирование смешанных формулировок задач магнитостатики на основе магнитного векторного и полного скалярного потенциалов, а также на основе объемных интегральных уравнений с кусочно-полиномиальной аппроксимацией намагниченности в пределах конечного элемента;
 - адаптация и тестирование комбинированного метода конечных и граничных элементов для 3D моделирования магнитных систем со сложной геометрией и нелинейной намагниченностью. Адаптация пакета COMSOL Multiphysics® на ресурсах МИВК для реализации этих методов;
 - разработка методов повышения эффективности и оптимизации численного моделирования сложных магнитных систем ускорителей, включая разработку масштабируемых алгоритмов с высоким потенциалом параллелизма;
 - проведение расчетов, направленных на исследование влияния разных факторов и оптимизацию режима работы циклотрона MSC230. В том числе, анализ частот бетатронных колебаний и фазового движения частиц в различных вариантах компьютерных моделей и при формировании магнитного поля циклотрона MSC230.
 - Моделирование физических явлений на основе уравнения состояния плотной ядерной материи
 - методы верификации результатов компьютерного моделирования сложных процессов в плотной ядерной материи на основе данных наблюдений за компактными звёздами и экспериментальных данных по соударениям тяжелых ионов, реализующие байесовские подходы для оценки свободных параметров моделируемых процессов;
 - методы и программы для моделирования процессов в сильновзаимодействующей горячей и плотной ядерной материи, возникающей в соударениях тяжелых ионов при энергиях NICA, включая процессы рассеяния и рождения частиц и образование кварк-глюонной плазмы;
 - создание единой информационно-вычислительной среды для унифицированной работы с разными моделями уравнения состояния, включая проведение интерактивных расчетов механических характеристик нейтронных звезд на основе уравнения состояния холодного и плотного вещества;
 - получение численных результатов, актуальных для понимания фундаментальных процессов в моделируемых системах.
 - Моделирование квантовых систем
 - развитие методов, сочетающих проблемно-ориентированное квантовое программирование и методы вычислительной математики, для получения новой информации о квантовых системах различной природы;

- разработка новых и адаптация существующих квантовых симуляторов для высокопроизводительных вычислений на компьютерах гибридной архитектуры; применение квантового программирования для моделирования квантовых вычислений и для решения ряда задач физики конденсированного состояния, физики высоких энергий, квантовой химии, искусственного интеллекта и др.;
 - разработка новых подходов для исследования квантовых систем на основе интеграции методов вычислительной физики, методов квантовой теории информации, гибридных методов квантово-классического программирования компьютерной математики и символьно-численных алгоритмов. Исследование на этой основе информационных характеристик и описание динамики квантовых состояний в физике элементарных частиц и ядер, квантовой химии, биофизике и др.;
 - исследование и классификация информационных характеристик состояний конечномерных квантовых систем в представлении фазового пространства квантовой теории для определения наиболее важных характеристик, необходимых для моделирования квантовых систем различных классов и для повышения эффективности квантовых вычислений.
- Квантовое интеллектуальное управление технологическими процессами и физическими установками в ОИЯИ
 - создание прототипа квантового нечеткого PID – регулятора и демонстрационного образца робота с встроенным прототипом регулятора;
 - создание прототипа интеллектуальной системы управления криогенными системами для сверхпроводящих магнитов ускорительного комплекса НИКА на основе квантового нечеткого PID – регулятора. Подготовка патента; методология построения и структура интеллектуальной системы управления ВЧ-станцией.
 - Квантовые вычисления в квантовой химии и физике
 - проверка эффективности квантовых алгоритмов вариационного типа, реализованных на квантовых симуляторах классической архитектуры посредством их применения к количественному описанию диссоциации простых молекул, а также электронной и спиновой структуры основного состояния типичных решеточных моделей квантовой теории.
 - Подготовка специалистов в области вычислительной физики и информационных технологий

Риски (SWOT-анализ)

	Плюсы	Минусы
Внутренние	Сильные стороны <ul style="list-style-type: none"> – широкая апробация исследований (на заседаниях руководящих органов ОИЯИ и большого числа международных конференций); – участники темы являются признанными специалистами в различных научно-исследовательских областях (информационные технологии, математическая физика, теоретическая и эксперименталь- 	Слабые стороны <ul style="list-style-type: none"> – ограничения для участников из РФ посещать ряд научных центров и международные конференции; – возможный частичный пересмотр приоритетов темы; – частичная нехватка кадров по ряду направлений темы.

	<p>ная физика элементарных частиц и атомного ядра, радиобиология); в тему входят 20 докторов и 45 кандидатов наук.</p> <ul style="list-style-type: none"> - опыт в области моделирования физических процессов, обработки и анализа экспериментальных данных, создания информационно-вычислительных систем и программных библиотек в крупнейших мировых исследовательских центрах (ОИЯИ, ЦЕРН, Фермилаб и пр.); - опыт участия в крупнейших международных коллаборациях (WLCG, ОИЯИ, ЦЕРН, DESY, Fermilab и др.) 	
Внешние	<p>Возможности</p> <ul style="list-style-type: none"> - развитие новых методов моделирования, обработки и анализа данных (большие данные, глубокое и машинное обучение и пр.); - появление новых экспериментальных данных, дающих импульс к развитию теоретических и вычислительных методов описания и расчета физических процессов; - развитие МИВК ОИЯИ и других мировых центров обработки данных; - увеличение доступности квантовых компьютеров 	<p>Угрозы</p> <ul style="list-style-type: none"> - возможные изменения сроков реализации исследовательских проектов ОИЯИ и других центров; - неопределенная ситуация с продлением соглашения о научном сотрудничестве ОИЯИ и ЦЕРН, возможность приостановки научного сотрудничества с другими мировыми центрами

Большая часть исследований связана с базовыми установками ОИЯИ, в случае прекращения действия соглашения о научном сотрудничестве ОИЯИ и ЦЕРН исследования, связанные с обработкой и анализом данных, будут частично продолжены с использованием открытых данных коллабораций (LHC Open Data).

2.4. Участвующие лаборатории ОИЯИ

ЛИТ (Абгарян В., Айриян А.С., Айрян Э.А., Акишин П.Г., Акишина Е.П., Александров Е.И., Александров И.Н., Амирханов И.В., Аникина А.И., Бадреева Д.Р., Баранов Д.А., Барашенков И.В., Башашин М.В., Бежаниян Т.Ж., Боголюбская А.А., Буреш М., Бутенко Ю.А., Буша Я. (мл.), Буша Я. (ст.), Волохова А.В., Войтишин Н.Н., Войтишина Е.Н., Воронцов А.С., Воскресенская О.О., Глуховцев П.И., Гнатич С., Годеридзе Д., Гончаров П.В., Гусев А.А., Григорян О.А., Дереновская О.Ю., Дикусар Н.Д., Земляная Е.В., Злоказов В.Б., Зрелова Д.П., Зрелов П.В., Зуев М.И., Иванов В.В., Иванцова О.В., Кадочников И.С., Казаков А.А., Казымов А.И., Калиновский Ю.Л., Карамышева Т.В., Катулин М.С., Кузнецова Е.А., Корняк В.В., Корсаков Ю.В., Костенко Б.Ф., Кулябов Д.С., Лукьянов К.В., Мавлонбердиева С.Д., Махалдиани Н.В., Минеев М.А., Михайлова Т.И., Мусульманбеков Ж.Ж., Нечаевский А.В., Никонов Э.Г., Олейник Д.А., Ососков Г.А., Палий Ю., Пальчик

В.В., Папоян В.В., Папоян Г.В. Пелеванюк И.С., Петросян А.Ш., Подгайный Д.В., Полякова Р.В., Пряхина Д.И., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Рапортиренко А.М., Рахромова А.Р., Решетников А.Г., Рихвицкий В.С., Рогожин И.А., Рябов А.Р., Рябов Н.В., Сархадов И., Саха Б., Сатышев И., Сердюкова С.И., Слепнев С.К., Слижевский К.В., Соловьев А.Г., Соловьева Т.М., Стрельцова О.И., Сюракшина Л.А., Тарасов О.В., Торосян А.Г., Тухлиев З.К., Ужинский А.В., Ужинский В.В., Ульянов С.В., Хведелидзе А., Червяков А.М., Чулуунбаатар Г., Чулуунбаатар О., Чулуунбаатар Х., Шарипов З.А., Ширикова Н.Ю., Шматов С.В., Юкалова Е.П., Юлдашев О.И., Юлдашева М.Б., Яковлев А.В., Ямалеев Р.М., Янович Д.А.)

ЛФВЭ (Алексахин В.Ю., Апарин А.А., Беспалов Ю.В., Бровко О.И., Будковский Д.В., Бычков А.В., Габдрахманов И.Р., Галоян А.С., Герценбергер К.В., Головатюк В.М., Дряблов Д.К., Жижин И.А., Жежер В.Н., Зинченко А.И., Зинченко Д.А., Зыкунов В.А., Капишин М.Н., Каржавин В.Ю., Коробицин А.А., Крылов А.В., Ленивенко В.В., Лобастов С.П., Мерц С.П., Мошкин А.А., Мудрох А.А., Никифоров Д.Н., Пацюк М., Решетников Г.П., Рогачевский О.В., Рябов В.Г., Шалаев В.В., Шульга С.Г.)

ЛТФ (Виницкий С.И., Гнатич М., Донков А.А., Казаков Д.И., Лукьянов В.К., Максимов П.А., Низмитдинов Р.Г, Рахронов И.Р., Савина М.В., Теряев О.В., Тонеев В.Д., Фризен А.В., Шукринов Ю.М., Юкалов В.И., Юшанхай В.Ю.)

ЛНФ (Балашою М., Вергель К.Н., Дима М.-О., Дима М.-Т., Иваньков А.И., Исламов А.Х., Киселев М.А., Ковалев Ю.С., Кушлин А.И., Кучерка Н., Пепельшев Ю.Н., Перепелкин Е.Е., Попов Е.П., Рижиков Ю.Л., Рогачев А.В., Ской В.В., Фронтасьева М.В.)

ЛЯП (Бедняков В.А., Белова А.П., Белолоптиков И.А., Борина И.В., Дик В., Елзов Т.В., Гринюк А.А., Гуськов А.В., Денисенко И.И., Жемчугов А.С., Звездов Д.Ю., Крылов В.А., Карамышев О.В., Карамышева Г.А., Киян И.Н., Курбатов В.С., Наумов Д.В., Пан А.Е., Сеитова Д., Сиренко А.Э., Сороковиков М.Н., Ткачев Л.Г., Храмов Е.В., Шайбонов Б.А., Шолтан Е.)

ЛЯР (Батчулуун Э., Карпов А.В., Мирзаев М.Н., Середа Ю.М., Самарин В.В)

ЛРБ (Бугай А.Н., Колесникова И.А., Северюхин Ю.С., Утина Д.М., Чижов А.В.)

УНЦ (Верхеев А.Ю., Юлдашев Б.С.)

2.5. Участвующие страны, научные и научно-образовательные организации:

Организация	Страна	Город	Участники	Тип соглашения
ННЛА	Армения	Ереван	Тумасян А. Айрапетян А. Геворкян А.	совместные работы
ГГУ	Беларусь	Гомель	Андреев В.В. Максименко Н.В.	совместные работы
НИИ ЯП БГУ	Белоруссия	Минск	Ермак Д.В., Макаренко В.В, Мосолов В.А.	совместные работы
Оксфордский университет	Великобритания	Оксфорд	Галлас Э.	совместные работы
Софийский университет	Болгария	София	Христов И.Г. Христова Р.Д.	совместные работы
ИНФН	Италия	Генуя	Барберис Д.	совместные работы

Китайский институт атомной энергии	Китай	Пекин	Чэнцзянь Л. Пейвей В.	совместные работы
СОГУ	Россия	Владикавказ	Гутнова А.К.	совместные работы
НИЦ КИ ПИЯФ	Россия	Гатчина	Ким В.Т. Кириянов А.К.	совместные работы
Коллаборация BM@N	Россия	Дубна	Капишин М.Н.	совместные работы
Коллаборация MPD	Россия	Дубна	Рябов В.Г.	совместные работы
Коллаборация SPD	Россия	Дубна	Гуськов А.В.	совместные работы
ИТЭФ	Россия	Москва	Никитенко А.Н.	совместные работы
НИИЯФ МГУ	Россия	Москва	Боос Э.Э. Дудко Л.В. Лохтин И.П. Кодолова О.Л. Петрушанко С.В.	совместные работы
НИЯУ "МИФИ"	Россия	Москва	Данилов М.В.	совместные работы
ФИАН	Россия	Москва	Дремин И.М.	совместные работы
ИФВЭ	Россия	Протвино	Петров В.А.	
СамГУ	Россия	Самара	Баскаков А.В., Салеев В.А.	совместные работы
СПбГУ	Россия	Санкт-Петербург	Богданов А.В., Дегтярев А.Б. Зароченцев А.К	совместные работы
СГУ	Россия	Саратов	Дербов В.Л.	совместные работы
ИЯИ РАН	Россия	Троицк	Гниненко С.Н.	совместные работы
Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM	Мексика	Мехико	Хесс П.О.	совместные работы
IMDT MAS	Монголия	Улан-Батор	Батгэрэл Б. Жанлав Т.	совместные работы
Техасский университет	США	Арлингтон	Озтурк Н.	совместные работы
ИРФУ, СЕА, университет Париж-Сакле	Франция	Сакле	Формика А.	совместные работы
Коллаборация ALICE	Швейцария	Женева	Левен М.В.	совместные работы
Коллаборация ATLAS	Швейцария	Женева	Хеккер А.	совместные работы
Коллаборация	Швейцария	Женева	Мак-Брайд П.	совместные

CMS				работы
ЦЕРН	Швейцария	Женева	Аволио Дж.	совместные работы
ЦЕРН	Швейцария	Женева	Рое Ш.	совместные работы
ЦЕРН	Швейцария	Женева	Рибон А.	совместные работы
Университет Кейптауна	ЮАР	Кейптаун	Алексеева Н.	совместные работы

2.6. Организации-соисполнители (те сотрудничающие организации/партнеры без финансового, инфраструктурного участия которых выполнение программы исследований по теме невозможно. Пример — участие ОИЯИ в экспериментах LHC в CERN).

3. Кадровое обеспечение

3.1. Кадровые потребности в течение первого года реализации

№№ п/п	Категория работника	Основной персонал, сумма FTE	Ассоциированный персонал, сумма FTE
1.	научные работники	74	5
2.	инженеры	6,8	1
3.	специалисты	9,1	
4.	руководители	2,1	
	Итого:	92	6

3.2. Доступные кадровые ресурсы

3.2.1. Основной персонал ОИЯИ (общее количество участников)

Категория работников	Подразделение	Должность	Сумма FTE
научные работники	ЛИТ	директор лаборатории, зам. директора лаборатории, ученый секретарь, советник директора, начальники отделов, начальники секторов	7,9
		г.н.с	4
		в.н.с.	13,8
		с.н.с.	24,55
		н.с.	8,2
		м.н.с.	4,5
		стажер-исследователь	6,4
		всего научных работников	69,35
инженеры	ЛИТ	инженер-программист	3,3

		инженер-программист 1 категории инженер-программист 2 категории всего инженеров	1,0 2,5 6,8
специалисты	ЛИТ	ведущий программист старший лаборант лаборант переводчик всего специалистов	6,5 1 1,5 0,1 9,1
руководители	ЛИТ	помощник директора заместитель начальника отдела начальник группы всего руководителей	0,8 0,8 0,5 2,1
Итого:			87,35

3.2.2. Ассоциированный персонал ОИЯИ

Категория работников	Организация-партнер	Сумма FTE
научные работники		
инженеры		
Итого:		

4. Финансовое обеспечение

4.1. Полная сметная стоимость темы

*	Наименование работ	Стоимость	Расходы в год (тыс. долл. США)		
			2024 г. (1-й год)	2025 г. (2-й год)	2026 г. (3-й год)
1.	Международное сотрудничество (МНТС)	450	150	150	150
2.	Материалы				
3.	Оборудование и услуги сторонних организаций	338,3	110	112,8	115,5
4.	Пуско-наладочные работы				
5.	Услуги научно-исследовательских организаций				
6.	Приобретение программного обеспечения	255	75	85	95
7.	Проектирование/строительство				
8.	Сервисные расходы (планируются в случае прямой принадлежности к проекту)				
ВСЕГО:		1043,3	335	347,8	360,5

4.2. Внебюджетные источники финансирования

СОГЛАСОВАНО:

Главный ученый секретарь ОИЯИ

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Руководитель ДБиЭП

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Руководитель ДНОД

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Руководитель ДкиД

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Директор лаборатории

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Ученый секретарь лаборатории

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Экономист лаборатории

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Руководитель темы

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Руководитель темы

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Зам. руководителя темы

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.

Зам. руководителя темы

_____/_____
“ ____ ” _____ 202_г.