

## Математическое моделирование в задачах вычислительной, инженерной и медицинской физики

### 1. Высокопроизводительные вычисления и параллельное программирование.

Подавляющее большинство современных вычислительных систем от огромных кластеров до ноутбуков, планшетов и смартфонов представляют собой параллельные архитектуры, состоящие из набора вычислительных узлов, многоядерных процессоров и ускорителей. Параллельные архитектуры позволяют добиться высокой производительности и решать трудоемкие с вычислительной точки зрения задачи. Для эффективного использования возможностей параллельных вычислительных систем применяются специальные инструменты, такие как MPI (Message Passing Interface), OpenMP (Open MultiProcessing), Shmem (Symmetric Hierarchical Memory access). Программы, использующие графические ускорители пишутся с использованием CUDA (Compute Unified Device Architecture), OpenCL (Open Computing Language) и OpenACC (Open Accelerators). Специальные методы программирования существуют для ускорителей Intel® Xeon™ Phi.

Различные аппаратные и программные средства могут быть эффективными для одних видов прикладных программ и малоэффективными для приложений других типов. По этой причине актуальным является исследование масштабируемости и эффективности различных реализаций вычислительных алгоритмов и их разработка с адаптацией под ту или иную параллельную вычислительную платформу. В качестве примера можно привести решатели систем линейных алгебраических уравнений. На практике приходится сталкиваться с тем, что для функций из различных библиотек имеются ограничения разного рода. В этом случае при решении трудоемких задач приходится прибегать к разработке новых версий решателей, в которых ограничения ослаблены или отсутствуют.

Интерес представляет разработка математических моделей параллельных и распределенных вычислений. Такие модели могут быть сформулированы и исследованы с использованием математического аппарата теории игр, теории конфликтного управления.

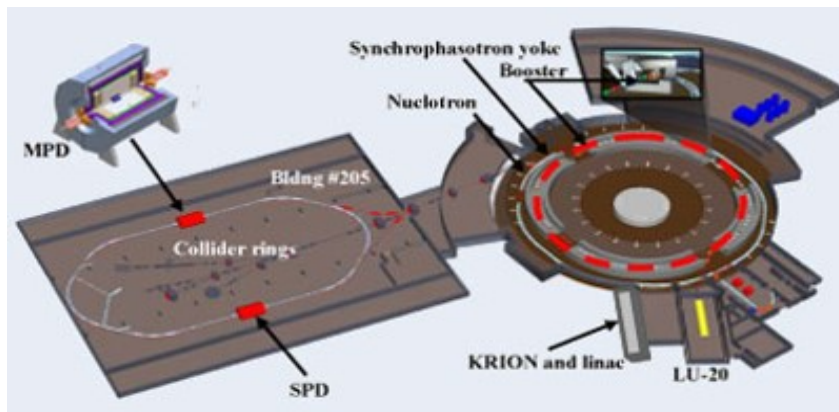
Важной является задача разработки методов статического анализа программ на уровне исходного кода и средств их полуавтоматического распараллеливания.

*Сотрудники кафедры вычислительной физики, работающие в данном научном направлении: С. А. Немнюгин, Е. А. Яревский, П. А. Белов.*

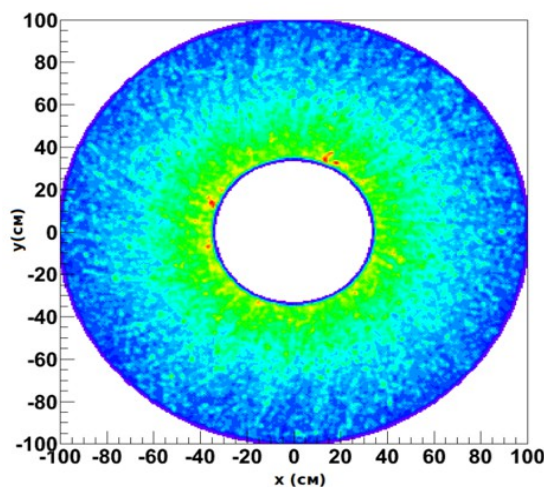
### 2. Разработка, модификация и применение программного обеспечения для физики высоких энергий.

Современный эксперимент в области физики высоких энергий является высокотехнологичным и невозможен без развитой ИТ-инфраструктуры, в том числе программного обеспечения, которое используется для обработки и визуализации экспериментальных данных, трекового анализа и восстановления событий, моделирования столкновений элементарных частиц при высоких энергиях и т.д. Это программное

обеспечение развивается, адаптируется для нужд конкретного ускорителя и детектора. Круг задач включает разработку и оптимизацию программного обеспечения, моделирование различных процессов. В качестве примера таких задач можно привести исследование динамики объемного заряда в трековой камере, моделирование взаимодействия элементарных частиц с элементами конструкции детектора, исследование физики явлений при высоких энергиях.



Работа выполняется в сотрудничестве с двумя важнейшими проектами: NICA и ATLAS. NICA – проектируемый российский адронный коллайдер в Объединенном институте ядерных исследований (ОИЯИ, Дубна). Предполагается активное, ответственное и результативное сотрудничество с исследовательскими группами в ОИЯИ. Работа связана с



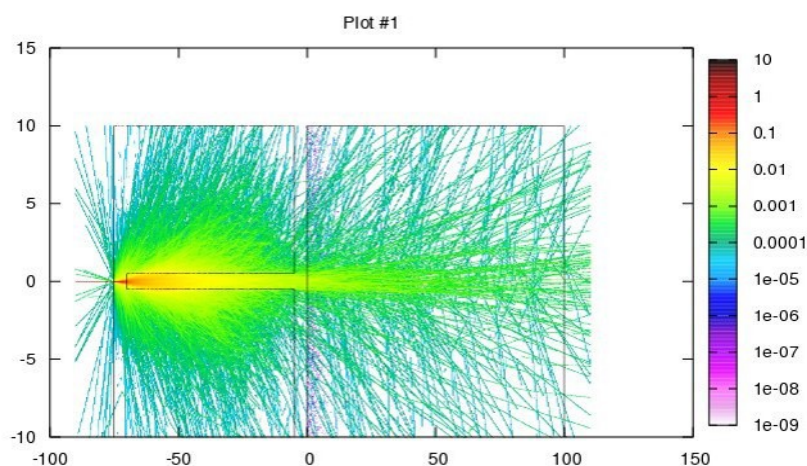
математическим моделированием в области физики ускорителей и физики элементарных частиц, разработкой и модификацией программного обеспечения, решением других задач. Все эти задачи имеют большое практическое значение.

Работа в рамках проекта ATLAS на Большом Адронном Коллайдере предполагает активное и результативное сотрудничество с исследовательскими группами Института ядерной физики (Гатчина). При условии активной работы в рамках проекта возможны командировки в ЦЕРН, включение в состав научной коллаборации, получение Нобелевской премии.

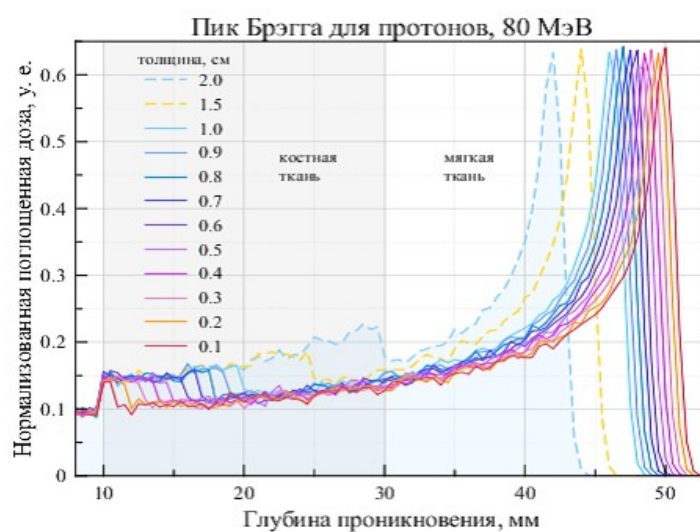
*Сотрудники кафедры вычислительной физики, работающие в данном научном направлении: С. А. Немнюгин.*

### 3. Моделирование взаимодействия пучков элементарных частиц с различными средами.

Пучки заряженных частиц могут применяться в различных областях – от медицины до сельского хозяйства. При облучении такими пучками вещества происходят различные процессы, учет которых возможен только с помощью программных инструментов математического моделирования. Одной из важнейших областей, где применяются пучки, является радиационная терапия, которая наряду с другими средствами применяется для



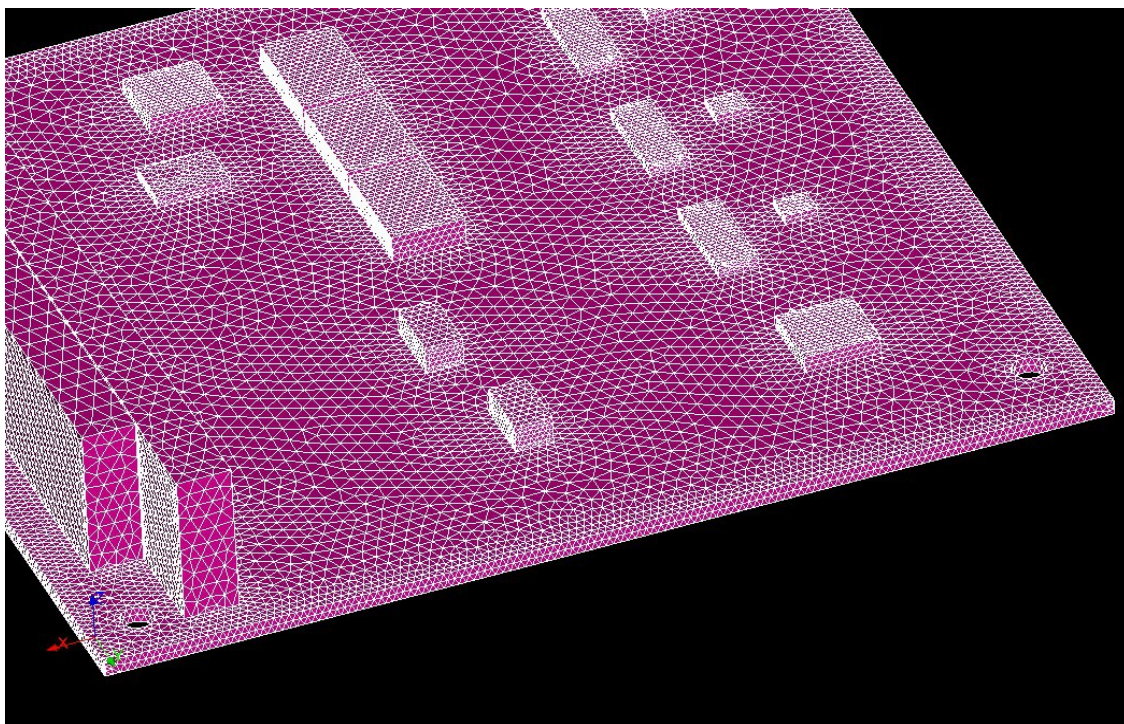
лечения онкологических заболеваний. Адронная терапия – перспективный раздел радиационной терапии. Исследование процессов, обуславливающих и сопровождающих терапевтическое воздействие пучка заряженных частиц на биологические ткани, важная и интересная задача. Основным инструментом исследования – пакеты моделирования GEANT4, FLUKA и другие. Предлагаемые направления работы – создание и развитие программного обеспечения, расчет профилей LET (Linear Energy Transfer) и другие.



*Сотрудники кафедры вычислительной физики, работающие в данном научном направлении: С. А. Немнюгин.*

#### 4. Решение инженерных задач, связанных с расчетом прочностных свойств различных конструкций.

Часто задачи строительной механики, связанные с расчетом реакции конструкций на внешние воздействия, решаются с помощью очень дорогих лицензионных универсальных зарубежных программных пакетов. В связи с этим важной является разработка отечественных программ и программных систем решения инженерных задач. Содержание работы в рамках данного направления: разработка программного обеспечения, расчеты с использованием метода конечных элементов, бессеточных и других вычислительных методов деформаций конструкций под воздействием нагрузок разного рода: статических и динамических, сосредоточенных и распределенных.



*Сотрудники кафедры вычислительной физики, работающие в данном научном направлении: С. А. Немнюгин, Е. А. Яревский.*

#### Публикации

1. G. V. Alferov, O. A. Malafeyev, S. A. Nemnyugin. Charged Particles Beam Focusing with Uncontrollable Changing Parameters // Second International Conference on Emission Electronics (ICEE), 2014.
2. Д.В. Курганов, С.А. Немнюгин. Ядро интернет-сервиса автоматического распараллеливания программ на уровне исходного кода // Сборник трудов Международная суперкомпьютерная конференция Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма — г. Москва, — 2013. — С. 483.
3. А.Е.Басалаев, А.С.Бондаренко, С. П. Мерц, С.А.Немнюгин, А.Н.Тимофеев. Применение технологий высокопроизводительных вычислений в задачах физики



- высоких энергий для проекта NICA/MPD // Вестник южно-уральского государственного университета. Серия: вычислительная математика и информатика, 2013. — Vol. 2, — № 1. — P. 17.
4. С.П.Мерц, С.А.Немнюгин, О.В.Рубан, Д.Е.Соснов. Применение технологий высокопроизводительных вычислений в задачах адронной терапии // Труды международной суперкомпьютерной конференции "Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений" — г. Москва, — 2012. — С. 384.
  5. А.Е.Басалаев, А.С.Бондаренко, С.А.Немнюгин, А.Н.Тимофеев. Применение технологий высокопроизводительных вычислений в задачах физики высоких энергий для проекта NICA/MPD // "Труды Международной суперкомпьютерной конференции «Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений» — Москва, — 2012. — P. 392.
  6. С.А.Немнюгин, С.П.Мерц, О.В.Рубан. Адроны и здоровье // Суперкомпьютеры, 2011. — Т. 8, — С. 48.
  7. Кавригин П.С., Мерц С.П., Немнюгин С.А., Толушкин С.Г. Использование программных пакетов Fluka и Geant4 для решения задач адронной терапии. // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: физика, химия, 2010. — № 4. — P. 131.
  8. Немнюгин С.А. Мерц С.П. Адронная терапия, транспорт частиц и высокопроизводительные вычисления. // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности — г. Москва, — 2009. — С. 191.
  9. С.С.Ананько, П.С.Кавригин, С.П.Мерц, С.А.Немнюгин, С.Г.Толушкин. Моделирование процессов распространения заряженных частиц и жесткого электромагнитного излучения с использованием технологий высокопроизводительных и распределённых вычислений. // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета, 2009. — № 80. — С. 246.
  10. Кияев В.И., Немнюгин С.А. Нужны ли России суперкомпьютеры и технологии суперкомпьютерных вычислений: вопрос, который часто звучит // Прикладная информатика, 2009. — № 6. — С. 49.
  11. Е.А. Яревский, С.А. Немнюгин, Чэнь Цзяндун. Расчет связанных состояний и резонансов квантовых трехчастичных систем на многоядерных и многопроцессорных системах // Труды международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2008)" — г. Санкт-Петербург, — 2008. — С. 276.
  12. А.Робачевский, С.А.Немнюгин, О.Л.Стесик. Операционная система UNIX. 2-е издание, переработанное и дополненное. — Санкт-Петербург: БХВ — Петербург, 2005.

13. Немнюгин С.А., Асрян А.Г., Феофилов Г.А., Науменко П., Солодков В., Вечернин В.В., Зароченцев А.С., Золотарёв В.И. Parallel Implementation of Parton String Model event generator. // Proceedings in High Energy and Nuclear Physics 2004 — Женева, Швейцария, — 2005. — Vol. 2, — P. 1201.
14. Немнюгин С.А., Стесик О.Л. Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. — Санкт-Петербург: БХВ — Петербург, 2002.
15. С.А. Немнюгин, М.П. Чаунин, А.В. Комолкин Эффективная работа: UNIX. — СПб: "Питер", 2001. — 688 P.
16. Немнюгин С.А., Чернов К.Б. Комбинированный метод монте-карловских интегралов по траекториям для расчетов характеристик квантовых малочастичных систем. // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 4: физика, химия, 1999. — № 18. — С. 104.
17. Немнюгин С.А., Малафеев О.А. Обобщенная динамическая модель движения системы в многокомпонентном внешнем поле, имеющем как детерминированные, так и стохастические составляющие. // Теоретическая и математическая физика, 1996. — Т. 107, — № 3. — С. 433.
18. Немнюгин С.А., Петров А.М. Monte-Carlo Calculation of Muonic Molecules. // Computer Physics Communications, 1996. — Vol. 97, — P. 175.
19. Меркурьев С.П., Немнюгин С.А. Calculation of the Properties of Bound States by the Monte-Carlo Method. // Few-Body Systems, 1993. — Vol. 14, — P. 191.
20. Меркурьев С.П., Немнюгин С.А. О влиянии локальных свойств управляющей функции в окрестности точки тройных столкновений на эффективность метода монте-карловских функций Грина в трехчастичных кулоновских расчетах. // Ядерная физика, 1992. — Т. 55, — С. 929.  
Монте-Карловских функций Грина. // Ядерная физика, 1990. — Т. 53, — С.