

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2012 г. Лабораторией информационных технологий в рамках направления «Сети, компьютеринг, вычислительная физика» проводились исследования по двум темам первого приоритета: «Информационное, компьютерное и сетевое обеспечение деятельности ОИЯИ» и «Математическая поддержка теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ». В рамках сотрудничества с другими лабораториями ОИЯИ сотрудники ЛИТ принимали участие в исследованиях по 25 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ.

Центральный информационно-вычислительный комплекс (ЦИВК) ОИЯИ является крупнейшим центром RDIG (российский грид для интенсивных операций с данными) в составе глобальной грид-инфраструктуры WLCG/EGEE/EGI, который обеспечивает поддержку виртуальных организаций меж-

дународных проектов, в том числе экспериментов на LHC. В 2012 г. в ОИЯИ было выполнено более 7,4 млн задач, затраты процессорного времени при этом составили более 152 млн ч в единицах NEPSpec06. Сайт ОИЯИ — один из наиболее эффективных сайтов уровня Tier2 в инфраструктуре WLCG (Worldwide LHC Computing Grid). В 2012 г. 45,5 % от полного счетного времени, затраченного в RDIG на задачи LHC, было обеспечено ОИЯИ.

В 2012 г. в России с участием ОИЯИ начались работы по созданию распределенного центра уровня Tier1. Организация центра предполагает поддержку экспериментов ALICE, ATLAS и LHCb на базе вычислительного комплекса НИЦ «Курчатовский институт», а поддержку эксперимента CMS — на базе ЦИВК ОИЯИ в Лаборатории информационных технологий.

СЕТЕВАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ

В 2012 г. продолжены работы, связанные с развитием и обеспечением надежного функционирования сетевой и информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ. Основными элементами этой инфраструктуры являются телекоммуникационные каналы связи, локальная вычислительная сеть (ЛВС), ЦИВК и базовое программное обеспечение, в том числе на основе грид-технологий, объединяющее информационно-вычислительные ресурсы Института в единую, доступную для всех пользователей среду.

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ. В 2012 г. поддерживалась надежная работа высокоскоростного канала связи Дубна–Москва. Для связи с научными сетями и сетью Интернет использовались следующие каналы связи: ЦЕРН (10 Гбит/с), RBnet (10 Гбит/с), GEANT (2×10 Гбит/с), московские научные сети (10 Гбит/с), RASnet (10 Гбит/с), RadioMSU (10 Гбит/с), E-арена (10 Гбит/с). В 2012 г. пропускная способность резервного канала связи была увеличена до 1 Гбит/с.

Таблица 1

| Подразделение | Входящий трафик, Тбайт | Исходящий трафик, Тбайт |
|-------------------------------|------------------------|-------------------------|
| ЛИТ | 64,79 | 58,26 |
| ЛЯП | 61,4 | 70,9 |
| ЛФВЭ | 55,3 | 49,35 |
| ЛНФ | 27,92 | 81,14 |
| ЛТФ | 19,73 | 16,02 |
| Узел удаленного доступа (VPN) | 17,62 | 4,33 |
| Управление | 15,13 | 31,12 |
| ГРК | 12,1 | 1,58 |
| ЛРБ | 7,25 | 3,46 |
| ЛЯР | 7,13 | 2,01 |
| Университет Дубна | 4,86 | 5,17 |
| НЦПИ | 3,27 | 0,27 |
| ОАО «НПК Дедал» | 3,24 | 0,7 |
| Образовательная сеть GRID | 2,74 | 0,07 |
| ООО «НПО Атом» | 2,22 | 0,75 |

Таблица 2

| Научно-образовательные цели | Файлообмен (torrent, ftp) | Веб-ресурсы | Социальные сети | Мультимедиа | Программное обеспечение | Обмен с сетями Дубны |
|-----------------------------|---------------------------|-------------|-----------------|-------------|-------------------------|----------------------|
| 91,22 % | 6,84 % | 1,32 % | 0,54 % | 0,04 % | 0,03 % | 0,01 % |

Распределение входящего и исходящего трафиков по подразделениям ОИЯИ в 2012 г. (превышающий по входящему трафику 2 Тбайта) приведено в табл. 1.

Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего доступа и ЦИВК, составил в 2012 г. 2642,09 Тбайт (в 2011 г. 1525,35 Тбайт). Процентное распределение входящего трафика по категориям приведено в табл. 2.

Локальная сеть ОИЯИ. В 2012 г. были продолжены работы, связанные с дальнейшим улучшением характеристик сети ОИЯИ и предоставлением пользователям дополнительных возможностей. Основные изменения касаются аппаратных и программных компонентов сетевой инфраструктуры, направленных на постоянное совершенствование и повышение отказоустойчивости ядра телекоммуникационной структуры ЛВС и уровня безопасности в условиях постоянного роста информационных потоков. В 2012 г. к опорной сети ОИЯИ на скорости 1 Гбит/с подключена Лаборатория радиационной биологии, расширена сеть управления ОИЯИ, развернут сервис беспроводной связи Wi-Fi в подразделениях ОИЯИ, включая гостиницу «Дубна» и профилакторий «Ратмино».

В 2012 г. значительно расширены возможности для проведения видеоконференций. Установлен единственный сервер конференц-связи Cisco/Tandberg MCU Codian 4505, способный обеспечивать настоящую мультимедийную среду высокой четкости, который позволяет организовать многоочечные видеоконференции.

Одними из важнейших элементов обеспечения надежного и безопасного функционирования всей информационно-вычислительной среды ОИЯИ являются система мониторинга инфраструктуры NMIS (Network Management Information System) и IPDB — база данных узлов сети ОИЯИ. Последняя используется для регистрации и авторизации элементов и пользователей сети, визуализации статистики использования сети, поддержки базы данных удаленных пользователей сети, базы данных пользователей электронных библиотек и т. п.

ЛВС ОИЯИ содержит 7222 сетевых элемента и 10128 IP-адресов. На 2012 г. зарегистрировано 3668 пользователей сети, более 1500 пользователей сервиса mail.jinr.ru, 1164 пользователя электронных библиотек и более 1000 пользователей удаленного доступа VPN.

Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ. В 2012 г. продолжено наращивание производительности и систем хранения данных ЦИВК. В настоящее время вычислительная ферма ЦИВК состоит из 2560 64-битных процессоров и системы хранения данных общей емкостью 1800 Тбайт. Центральный маршрутизатор сети ЦИВК соединен с основным маршрутизатором сети ОИЯИ на скорости 10 Гбит Ethernet.

Большое значение для развития всей информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ и ее грид-сегмента имеют работы по созданию совместно с НИЦ «Курчатовский институт» автоматизированной системы обработки данных экспериментов на ЛНС уровня Tier1. Генеральный план этого проекта состоит из трех основных этапов в 2012–2014 гг. Первый этап — создание прототипа работающего центра с общей мощностью компьютерных ресурсов на уровне 10 % от номинального центра Tier1. Для этих целей в 2012 г. приобретено 1200 64-битных процессоров, дисковая память в размере 660 Тбайт и ленточная система общим объемом 72 Тбайта. Второй этап должен быть завершен к концу 2013 г. созданием полномасштабного центра уровня Tier1. Последующее увеличение компьютерных ресурсов будет осуществляться в течение 2014 г.

Вычислительные средства и системы хранения информации управляются базовым программным обеспечением, позволяющим использовать ресурсы ЦИВК как в международных проектах для распределенных вычислений (WLCG, FUSION, BIOMED, HONE, PANDA, CBM, NICA/MPD и др.), так и локальными пользователями ОИЯИ.

Базовой операционной системой для ЦИВК является ОС Scientific Linux SL5 с архитектурой x86_64 (на ряд серверов поддержки WLCG установлены ОС версии SL6).

На ЦИВК установлен набор свободно распространяемых компиляторов для различных языков программирования (C/C++/FORTRAN и др.), считающихся стандартными компиляторами для Unix-подобных операционных систем. Кроме того, установлены Intel C/C++/FORTRAN Compilers — компиляторы нового поколения, позволяющие обеспечить высокую производительность на процессорах Intel. Компиляторы Intel дополнены эффективными средствами разработки многопоточного кода, поддерживающими стандарт OpenMP. Для разработки параллельных программ с использованием пакета MPI (Message Passing Interface) установлены библио-

теки MPI для языков программирования C, C++ и FORTRAN.

Интерактивный доступ пользователей ОИЯИ к вычислительным ресурсам и дисковым хранилищам данных ЦИВК обеспечен с помощью так называемого интерактивного кластера из пяти компьютеров. Специальный сервер и рабочие узлы кластера обеспечивают пакетную обработку заданий, как запущенных с интерактивных машин локальными пользователями, так и получаемых из глобальной среды WLCG. Серверы системы управления загрузкой кластера используются для распределения задач (локальных пользователей и WLCG) на различные сайты проекта WLCG. Сервис X509 PX (ProXy) хранит и обновляет сертификаты пользователей для защиты ресурсов и задач пользователей в грид-системах. Это основной метод контроля зарегистрированных пользователей в проекте WLCG. На кластере поддерживается распределенная файловая система CVMFS (CernVM File System), обеспечивающая доступ к программному обеспечению коллабораций ATLAS, CMS, LHCb и BES, которое установлено на серверах в ЦЕРН. Два VObx (Virtual Organization box) используются коллаборациями ALICE и CMS для обеспечения своей работы на сайтах WLCG.

Системы хранения и доступа к данным dCache и XROOTD обеспечивают работу с данными как для локальных пользователей ОИЯИ, так и для внешних пользователей. Поддерживаются две инсталляции dCache: dCache-1 — для экспериментов CMS и ATLAS; dCache-2 — для локальных пользователей, групп пользователей и международных проектов NICA/MPD, HONE, FUSION, BIOMED, COMPASS. Три инсталляции системы доступа к данным XROOTD поддерживают работу с данными трех международных коллабораций ALICE, PANDA и CBM. Все системы хранения построены с использованием аппаратного механизма RAID6.

В состав ЦИВК входят несколько специализированных машин для поддержки локальных и международных коллабораций пользователей: проекты NICA/MPD, PANDA-GRID и CBM.

Таблица 3

| Лаборатория/ группа | Число заданий | Процессорное время, kSi2K·ч | Астрономи- ческое время, kSi2K·ч |
|------------------------|------------------|-----------------------------------|--|
| MPD | 27346 | 194656,04 | 205650,00 |
| PANDA | 26266 | 49550,08 | 92931,83 |
| ЛЯП | 21323 | 1353695,19 | 401150,82 |
| COMPASS | 17182 | 186303,33 | 189458,43 |
| ЛФВЭ | 16782 | 453440,61 | 464766,41 |
| KLOD | 15894 | 136267,78 | 136967,64 |
| BES | 6217 | 49043,03 | 50794,43 |
| ЛТФ | 1698 | 260697,83 | 254593,52 |
| ЛИТ | 1566 | 852901,18 | 66902,14 |
| ЛНФ | 678 | 99630,53 | 99825,76 |
| SIMSRVR | 420 | 8524,20 | 8559,42 |
| ЛРБ | 370 | 186664,84 | 44115,51 |

В табл. 3 приведена статистика пакетных заданий (больше 300) в 2012 г. по подразделениям Института и группам пользователей, за исключением задач грид-среды.

Грид-среда ОИЯИ. В 2012 г. продолжалась активная работа в рамках крупномасштабных грид-проектов: «Всемирный вычислительный грид для ЛHC» (WLCG, <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>) и «Европейская грид-инфраструктура» (EGI-InSPIRE — Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe, <http://www.egi.eu/projects/egi-inspire/>). ЦИВК ОИЯИ как грид-сайт JINR-LCG2 глобальной грид-инфраструктуры поддерживает вычисления десяти виртуальных организаций (alice, atlas, biomed, cms, dteam, fusion, hone, lhcb, bes и ops), а также предоставляет возможность использования грид-ресурсов для экспериментов CBM и PANDA. Основными пользователями грид-ресурсов ОИЯИ являются виртуальные организации всех экспериментов на ЛHC.

Таблица 4

| ВО | Процессорное время, HEPspec06 | Число заданий |
|--------|----------------------------------|------------------|
| cms | 56 601 508 | 1 082 540 |
| atlas | 51 290 108 | 4 453 229 |
| alice | 29 965 312 | 1 256 509 |
| lhcb | 14 549 848 | 425 068 |
| biomed | 1 037 172 | 97 483 |
| fusion | 698 528 | 3 940 |
| hone | 630 420 | 20 074 |
| bes | 239 408 | 8 335 |
| ops | 1 068 | 66 578 |
| dteam | 0 | 194 |
| Всего | 155 013 372 | 7 413 950 |

Для обслуживания грид-сайта в ОИЯИ установлено 22 сервера с ПО промежуточного уровня gLite/EMI проекта WLCG. Кроме функций поддержки работы самого сайта JINR-LCG2 часть серверов реализует важные сервисы и функции поддержки российского сегмента проекта WLCG. С учетом надежности и доступности сайт ОИЯИ является одним из наиболее эффективных сайтов уровня Tier2 в мире. В 2012 г. выполнен большой объем работ по приему и обработке данных для экспериментов ALICE, ATLAS и CMS в ОИЯИ. В табл. 4 приведены данные по использованию в 2012 г. грид-инфраструктуры ЦИВК ОИЯИ виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI. В настоящее время грид-сайт JINR-LCG2 является лучшим среди сайтов RDIG. Вклад ОИЯИ в обработку заданий RDIG и экспериментов ALICE, ATLAS и CMS в 2012 г. приведен на диаграммах рис. 1.

Важное место занимает разработка и развитие программного обеспечения распределенного компьютеринга. В частности, разработка компонентов распределенной системы управления данными,

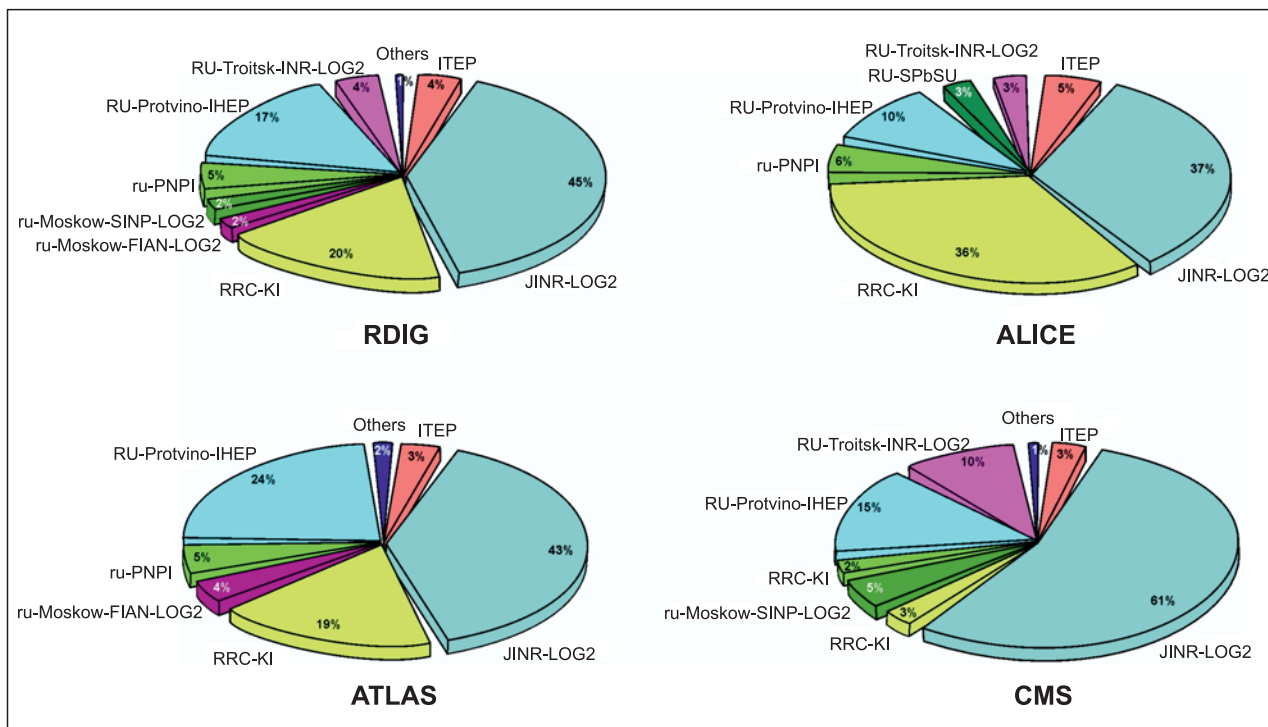


Рис. 1. Вклад ОИЯИ в обработку заданий RDIG и экспериментов ALICE, ATLAS и CMS в 2012 г.

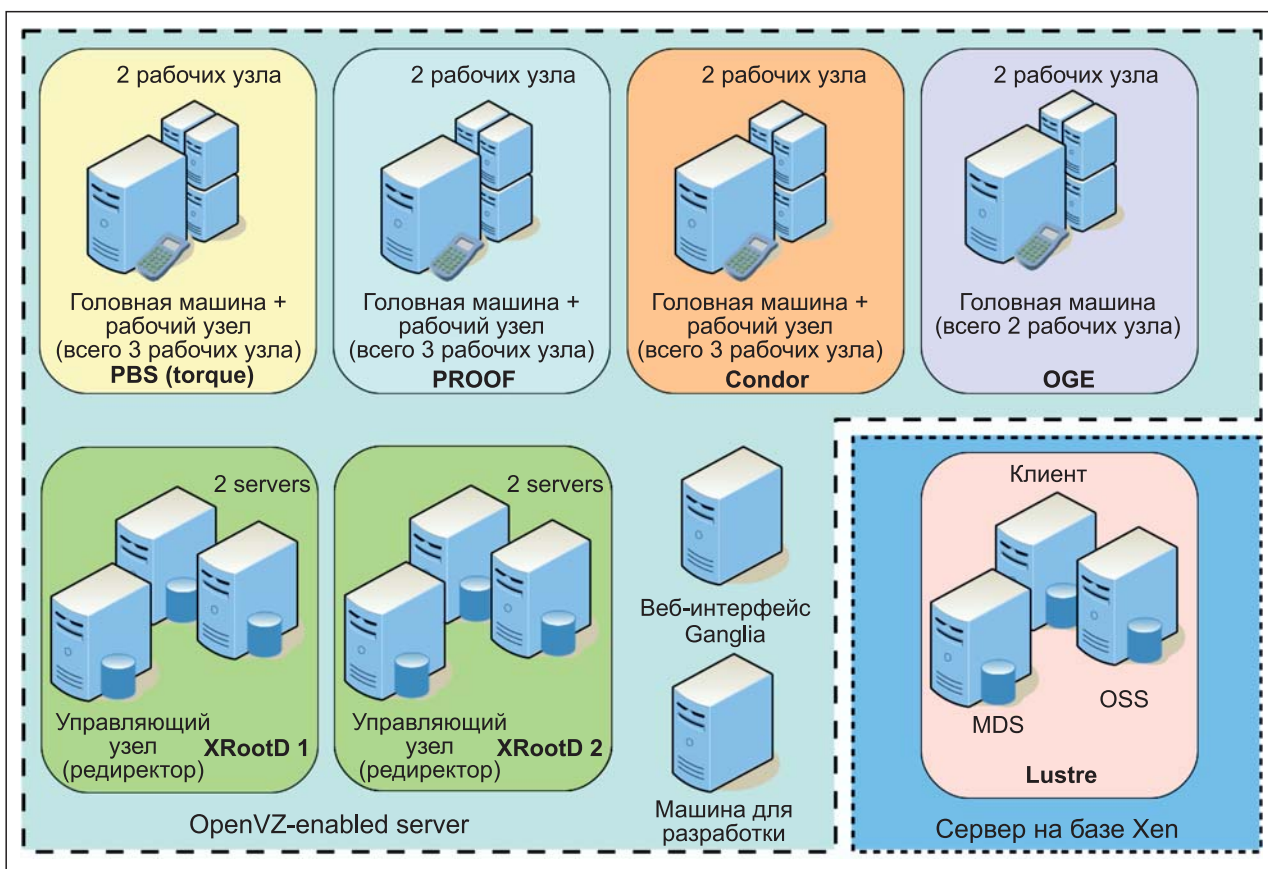


Рис. 2. Схема тестовой среды на базе виртуальных кластеров для исследования разных конфигураций центров уровня Tier3

а именно сервис удаления данных для эксперимента ATLAS [1]. Данные эксперимента ATLAS распределены более чем на 100 грид-сайтах с общим объемом дискового пространства около 150 Пбайт, в котором хранятся сотни миллионов файлов. Недельный объем удаляемых данных составляет 2 Пбайта (20 000 000 файлов).

В последние годы система распределенной обработки данных экспериментов на ЛНС пополнилась новым инфраструктурным слоем, состоящим из центров уровня Tier3, который вносит существенный вклад в физический анализ экспериментальных данных. К этому уровню относятся разнообразные вычислительные ресурсы (серверы, кластеры, суперкомпьютеры), находящиеся вне централизованного управления и планирования, на которые не распространяются какие-либо единые требования, касающиеся технических решений. Для исследования центров уровня Tier3 в ОИЯИ разработана архитектура тестовой инфраструктуры (рис. 2), которая позволяет создавать прототипы различных конфигураций центров уровня Tier3. Эта инфраструктура реализована на базе виртуальных кластеров, что позволяет настроить или разработать средства локального мониторинга, выработать полные рекомендации по системе сбора информации для глобального мониторинга центров уровня Tier3 [2].

Для эксперимента ATLAS в рамках проекта ТЗМОН разработан пакет программ, позволяющий проводить мониторинг Tier3-сайтов, не входящих в грид-инфраструктуру [3].

Развитие грид-технологий делает все более востребованной задачу адаптации существующих приложений для их использования в грид-инфраструктуре. Для работы пользователей в среде ГридННС (грид национальной нанотехнологической сети) и российской грид-сети (РГС) в ЛИТ ОИЯИ проведена адаптация целого ряда пакетов программ и программных комплексов: системы Elmer для анализа широкого спектра физических моделей методом конечных элементов, набора программ Molpro (*ab initio* расчеты электронной структуры молекул с высокой точностью), программного пакета Blender (создание и работа с 3D-моделями), пакета программ общего назначения DL_POLY (моделирование процессов в области классической молекулярной динамики), пакета GEANT4-DNA (моделирование биологических повреждений, вызванных ионизирующей радиацией на клеточном или субклеточном уровне) [4]. Для работы в РГС адаптированы пакеты Fire Dynamics Simulator — FDS (моделирование пожаров и задымлений) и ZondGeoStat (обработка геофизических и геохимических данных).

В 2012 г. продолжалась разработка модели распределенного компьютеринга для проекта NICA. На базе пакета GridSim создана имитационная модель системы хранения и обработки данных ускорительного комплекса. Моделирование позволит опреде-

лить параметры системы обработки информации на этапе технического проектирования. Исходя из результатов моделирования можно сформулировать требование к архитектуре системы для сбора, передачи, обработки и хранения данных с установок, генерирующих большие объемы данных [5].

Информационная и программная поддержка.

В рамках этого направления в 2012 г. осуществлялись развитие и поддержка информационных WWW/FTP/DBMS-серверов ОИЯИ и ЛИТ, создание и хранение электронных документов научно-административной деятельности ОИЯИ. На регулярной основе проводилось сопровождение и модернизация баз данных административно-хозяйственного профиля (совместно с НТО АСУ ОИЯИ). Регулярно велась разработка, создание и поддержка специализированных информационных веб-сайтов, сайтов различных конференций, совещаний, симпозиумов, организаторами которых являлись лаборатории ОИЯИ, а также организация хостинга веб-сайтов (по заявкам организаторов). Среди этих работ веб-порталы Международного семинара по взаимодействию нейтронов с ядрами (<http://isinn.jinr.ru/>) для ЛНФ им. И. М. Франка, V Международной школы по нейтринной физике им. Б. М. Понтекорво (<http://pontecorvosch.jinr.ru/>) для ЛЯП им. В. П. Желепова, 6-го Международного симпозиума по экзотическим ядрам (<http://exon2012.jinr.ru/>) для ЛЯР им. Г. Н. Флерова, Международной молодежной конференции-школы «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (<http://mpamcs2012.jinr.ru/>). Продолжались работы по сопровождению и модернизации веб-портала журналов «Физика элементарных частиц и атомного ядра» (ЭЧАЯ) и «Письма в ЭЧАЯ» (<http://pepan.jinr.ru/>).

В 2012 г. проводилась модернизация, наполнение информацией и разработка средств визуализации для представления результатов поиска в репозитории научных публикаций и документов ОИЯИ JINR Document Server (JDS), <http://jds.jinr.ru>, созданного в рамках Open Access Initiative на базе программного обеспечения CDS Invenio. Осуществлялось сопровождение и развитие программного обеспечения по автоматизации информационно-библиотечной деятельности НТБ ОИЯИ — наполнение и сопровождение электронных коллекций бюллетеней НТБ ОИЯИ, сопровождение электронных каталогов, поддержка и развитие веб-сайта НТБ ОИЯИ.

Традиционным направлением деятельности ЛИТ является развитие и сопровождение библиотеки JINRLIB и сопровождение библиотек программ, разработанных другими научными центрами и организациями (CERNLIB, CPC Program Library). Информация о новых поступлениях размещена в очередном Информационном бюллетене ЛИТ http://lit.jinr.ru/Inf_Bul_6/.

В 2012 г. были продолжены работы по внедрению системы ART EVM (Activity Planning Tool Earned Value Management), которую планируется использовать для управления проектом NICA. Функционал ART EVM позволяет проводить финансовый анализ текущего состояния проекта, оценивать эффективность средств, расходуемых на проект, а также получать прогнозные оценки финансовых затрат к

моменту завершения проекта. Проведена инсталляция системы на удаленной площадке в ЦЕРН, осуществлен ввод первоначальных данных в систему, подготовлен и протестирован функционал интеграции системы EVM с финансовой системой ADB2 ОИЯИ, запущен регулярный обмен данными между EVM и ADB2.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Обеспечение математической алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ, является важным направлением научной деятельности ЛИТ. В 2012 г. по результатам исследований опубликовано около 200 статей, из них 72 — в реферируемых журналах. На международных и российских конференциях представлено 37 докладов. Ниже приведена краткая информация о некоторых из полученных результатов.

Для эксперимента CBM (FAIR) разработан и реализован ряд высокоточных и быстрых алгоритмов для идентификации электронов с помощью детектора черенковского излучения (RICH) и детектора переходного излучения (TRD). Быстрый алгоритм распознавания колец в RICH-детекторе основан на преобразовании Хафа. Для идентификации электронов в RICH разработан эффективный алгоритм на основе искусственной нейронной сети. Для реконструкции треков в детекторе TRD реализован алгоритм, использующий метод фильтра Кальмана [6].

Рассмотрена проблема идентификации электронов в условиях доминирующего фона от пионов с помощью многослойного детектора переходного излучения TRD в эксперименте CBM. С этой целью развиты и исследованы разные математические методы, в том числе несколько методов на основе непараметрического критерия согласия ω_n^k . Рассмотрены характерные свойства распределений потерь энергии электронов и пионов в радиаторах TRD и обусловлены специфические особенности применения традиционных статистических методов, методов на основе критерия согласия ω_n^k и искусственных нейронных сетей. Проведен сравнительный анализ мощностей этих методов и даны рекомендации по их применению [7].

Исследованы различные варианты дипольного магнита для эксперимента CBM. Проведен сравнительный анализ резистивных и сверхпроводящих опций магнита. С помощью программ OPERA3D и TOSCA построены трехмерные модели различных

вариантов магнитов типа «оконной рамы» и H-типа. Проведена оптимизация параметров магнитов с целью уменьшения сил Лоренца, действующих на обмотки. Для проведения моделирования физических процессов в эксперименте CBM создана трехмерная карта поля для финального варианта магнита H-типа.

В рамках проекта ускорительного комплекса FAIR (GSI) проводились исследования квадрупольных и дипольных сверхпроводящих магнитов ускорителя SIS100. Было проанализировано динамическое воздействие вихревых токов в вакуумной камере на качество поля в рабочей области магнита. С целью улучшения качества краевого поля дипольного магнита ускорителя SIS100 проведена оптимизация профиля магнита на его краях.

В рамках работ по ускорительному комплексу NICA была построена трехмерная модель дипольного магнита бустера. Проведен анализ качества поля в рабочей области магнита.

Новый асинхронный алгоритм дифференциальной эволюции (АДЭ) использован для определения параметров микроскопического оптического потенциала упругого рассеяния пионов на ядрах ^{28}Si , ^{58}Ni и ^{208}Pb при энергиях 130, 162 и 180 МэВ. Этот алгоритм обеспечивает более широкие возможности распараллеливания и ускорения вычислений. Получено хорошее согласие с экспериментальными данными, что, с одной стороны, подтверждает возможности алгоритма АДЭ решать многопараметрические оптимизационные задачи со сложным многомодальным профилем целевой функции, а с другой — позволяет сделать ряд выводов о механизме пион-ядерного рассеяния и наметить пути дальнейшего развития модели микроскопического оптического потенциала [8].

Разработана программа VSHEC для калибровки спектрометрических детекторов, позволяющая проводить калибровку (перевод выходных каналов измерительного устройства в физические величины: энергию, время, угол и т.д.) автоматически, что имеет важное значение для калибровки много-

детекторных систем с числом регистрирующих устройств, достигающим сотен. В качестве опорных каналов при калибровке выступают центры тяжести пикообразных распределений, что приводит к необходимости проведения процедуры распознавания образов. Автоматическая калибровка определяет параметры зависимости «канал – физическая величина» на основе опознанных опорных пиков и списка ссылок на физические величины, к которым могут относиться некоторые из найденных пиков [9].

Определена область локальной и полулокальной сходимости непрерывного аналога метода Ньютона и предложены стратегии оптимального выбора итерационного параметра. Доказана глобальная сходимость и получены оценки погрешности. Стратегии выбора позволяют расширить область начальных итерационных параметров, при которых метод сходится. Дано сравнение различных предложенных и известных стратегий выбора итерационного параметра [10].

Разработана вычислительная схема для численного решения прямой и обратной задачи рассеяния на сферически-симметричных потенциалах, зависящих от параметров. Задача рассеяния для радиального уравнения Шредингера, в отличие от постановки ее как задачи Коши, формулируется как граничная задача для волновой функции с нелинейным асимптотическим условием, в котором неизвестная фаза рассеяния исключена. Фаза определяется после вычисления с помощью итераций на основе непрерывного аналога метода Ньютона волновой функции с учетом ее асимптотики. Обратная задача для уравнения с потенциалом, зависящим от параметров, сводится к минимизации по параметрам функционала, представляющего собой сумму квадратов отклонений заданных значений фаз от вычисленных. Особенности вычислительных схем продемонстрированы решением задачи с потенциалом Морзе, имеющей аналитическое решение, и задачи с потенциалом Вудса–Саксона [11].

Исследованы свойства скалярного σ -мезона вблизи критической конечной точки в модели Намбу–Йона-Лазинио с петлей Полякова. Проведен модельный анализ фазовой диаграммы сильновзаимодействующей материи. Изучена температурная зависимость ширины распада $\sigma \rightarrow \pi\pi$ при нулевом химическом потенциале вблизи критической конечной точки. Вычисленные константа $g_{\sigma \rightarrow \pi\pi}$ и ширина распада сравниваются как с имеющимися экспериментальными данными, так и с результатами, полученными в других моделях. Показано, что при нарушении условия $m_\sigma \geq 2m_\pi$ вблизи критической конечной точки имеется нетермальное усиление полной ширины распада σ -мезона [12].

Проведено численное исследование влияния ненулевого импульса фотона на трехкратное дифференциальное сечение $(\gamma, 2e)$ -процесса. Вследствие малого значения импульса фотона исследуемые эф-

фекты являются слабыми и проявляются только при специальных кинематических условиях, таких как разлет испущенных электронов в противоположные стороны с равными энергиями. Детально исследовались такие мишени, как атом гелия и гелиеподобные положительные ионы. Было обнаружено, что максимальное значение сечения в запрещенной для дипольного приближения области углов и энергий достигается при относительно небольших энергиях фотона. И хотя этот эффект остается небольшим по амплитуде, порядка нескольких $\text{мб} \cdot \text{эВ}^{-1} \cdot \text{ср}^{-2}$, этого достаточно для его экспериментального наблюдения [13].

В рамках метода моментов функции Вигнера с учетом спиновых степеней свободы изучена связанная динамика низколежащих возбуждений атомных ядер, включая ножничную моду, и гигантского квадрупольного резонанса. Уравнения движения для коллективных переменных получены на основе зависящих от времени уравнений Хартри–Фока в модели гармонического осциллятора со спин-орбитальным потенциалом и квадруполь-квадрупольным остаточным взаимодействием. Учет спина позволяет ввести в рассмотрение новый тип ядерного коллективного движения [14].

Представлены результаты измерений однократного дифференциального сечения реакции перезарядки протона на атоме гелия при энергиях протона 630, 1000 и 1200 кэВ. При этом как ион гелия, так и атом водорода в конечном состоянии остаются в их основных состояниях. Представлены также теоретические расчеты в первом и втором плосковолновых борновских приближениях (ВПБП) по потенциалам взаимодействия, а также в приближении искаженных волн. ВПБП вычисляется в контактном приближении и дает хорошее согласие с экспериментом при малых углах рассеяния при всех рассмотренных энергиях [15].

В работе [16] устанавливается вид релятивистской силы, действующей со стороны электроскалярного поля на электрически заряженную частицу, и релятивистский закон сложения электромагнитных поперечных и электроскалярных продольных полей. Определена релятивистски-инвариантная форма лагранжиана, описывающего взаимодействие электроскалярного поля с массивной электрически заряженной частицей.

В описании вычислений с плавающей запятой интеграла с помощью интерполяционной квадратурной суммы использование алгебраической степени точности d должно быть заменено определенной плавающей запятой степенью точности d_{fp} , значение которой значительно меняется в зависимости от размера и локализации области интегрирования на вещественной оси. Использование d_{fp} вместо d резко сужает допустимые границы изменения подынтегральной функции в байесовой автоматической адаптивной квадратуре [17].

Рассмотрены конечно-разностные аппроксимации систем полиномиально-нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, коэффициенты которых могут быть отношениями многочленов от независимых переменных над полем рациональных чисел. Введено понятие сильной аппроксимации (с-аппроксимации) систем указанного вида на равномерных и ортогональных сетках. Обсуждается алгоритмическая проверка с-аппроксимации конструктивными методами дифференциальной и разностной алгебр и с использованием систем компьютерной алгебры [18].

Усовершенствованы алгоритмы и их программные реализации на языках Maple и C для исследования систем нелинейных алгебраических, дифференциальных и разностных уравнений путем приведения их к гребнеровской форме [19].

Разработаны и реализованы на языках Maple и FORTRAN символьно-численные алгоритмы моделирования динамики ансамблей несферических квантовых точек и других низкоразмерных водородоподобных квантовых наноструктур под воздействием сильных магнитных полей [20]. На рис. 3 показан профиль волновой функции, вычисленный для одного из резонансных высоковозбужденных (ридбергеровских) состояний атома водорода при значении магнитного квантового числа $m = -200$ и z -четности $\sigma = +1$.

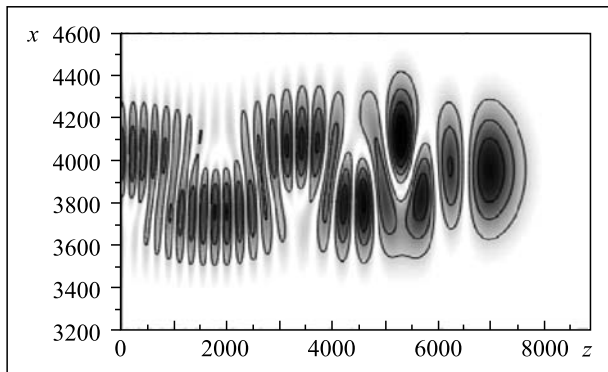


Рис. 3. Профиль волновой функции, вычисленный для одного из резонансных высоковозбужденных (ридбергеровских) состояний атома водорода при значении магнитного квантового числа $m = -200$ и z -четности $\sigma = +1$

В рамках конечной квантовой механики показано [21], что любую квантово-механическую задачу можно сформулировать в терминах перестановок. При этом квантовые интерференции представляют собой явления, возникающие в инвариантных подпространствах перестановочных представлений группы симметрий дискретной системы, а наблюдаемые величины могут быть выражены в терминах перестановочных инвариантов. В таком подходе для количественного описания квантово-механических

явлений достаточно использовать поля циклотомических чисел — минимальные расширения натуральных чисел, достаточные для квантового формализма.

Квантовая запутанность спинов двух тяжелых частиц, образующих связанное состояние и движущихся в сильном лазерном поле, исследована в рамках квазиклассического подхода [22]. В этом подходе матрица плотности находится как решение уравнения фон Неймана с эффективным гамильтонианом, описывающим спин-лазерное взаимодействие вдоль классической траектории. Этим путем эволюция конкуренции запутанных спинов вычислена для максимально запутанного вернеровского состояния и для начально сепарабельного состояния.

Разработан и оптимизирован пакет на языке Maple для вычисления двухпетлевых фейнмановских диаграмм пропагаторного типа со всеми произвольными массами и произвольной импульсной переменной [23]. Разработана и реализована на языках Maple и FORM процедура вычисления соответствующих тензорных интегралов высокого ранга (до восьмого).

Приведен обзор некоторых проблем современной космологии и кратко обсуждены наиболее популярные модели, использующие темную энергию. Показано, что модель со спиновым полем может разрешить ряд первоочередных задач современной космологии. Отмечено, что нетривиальность недиагональных компонент тензора энергии-импульса спиновых полей накладывает некоторые сильные ограничения на метрические функции [24]. Исследованы вопросы эволюции Вселенной с учетом спиновых моделей жидкости и темной материи (рис. 4) [25].

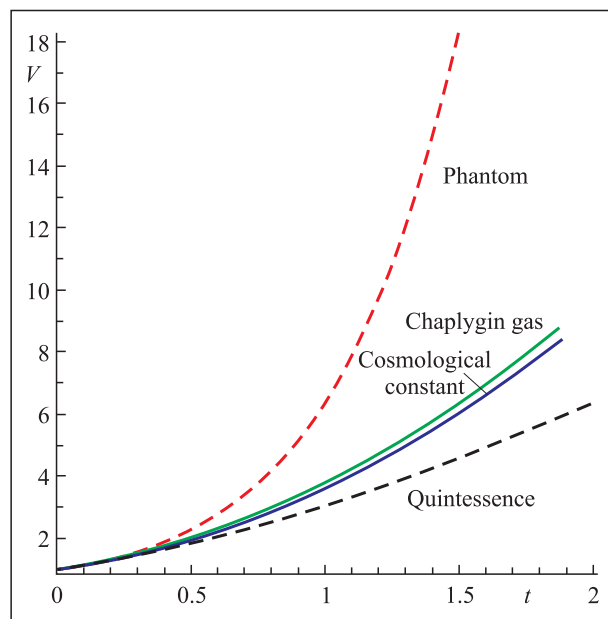


Рис. 4. Эволюция Вселенной, заполненной темной материей

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

Исследования и работы ЛИТ ведутся в тесном сотрудничестве с учеными и специалистами стран-участниц ОИЯИ и многих научных центров других стран. Отметим некоторые примеры такого сотрудничества.

Для обучения пользователей и системных администраторов работе в грид-среде в ЛИТ ОИЯИ продолжает функционировать и расширяться учебная инфраструктура (<http://gridedu.jinr.ru>). Развернута локальная «облачная» инфраструктура на базе ПО OpenNebula с драйвером для гипервизора OpenVZ. Сервисы учебно-исследовательской и тестовой грид-инфраструктуры переведены на эту платформу. На учебно-исследовательской грид-инфраструктуре были созданы полигоны для разработки прототипа подсистемы хранения данных российской грид-сети, а также для участия в исследовательских работах по направлению ATLAS XRootD federation. Проведена интеграция грид-сайта Института физики (Баку) в учебно-исследовательскую грид-инфраструктуру. В настоящий момент в эту систему включены восемь грид-сайтов в странах-участницах ОИЯИ и три сайта в ОИЯИ. В рамках обучения пользователей и системных администраторов из стран-участниц ОИЯИ в 2012 г. были проведены занятия для системных администраторов из Института теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Национального технического университета Украины «Киевский политехнический институт» и Института сцинтилляционных материалов НАН Украины по установке грид-сервисов EMI2, XRootD и AliEn, учебный курс для системных администраторов из Египта, Монголии и Азербайджана по установке базового набора грид-сервисов EMI2, практика по грид-технологиям для студента из ЮАР.

В сотрудничестве с университетом Пловдива и ЛТФ проведено исследование критических режимов в рамках модели длинных джозефсоновских контактов, описываемой уравнением двойного синус-Гордона [26]. Представленный подход основан на рассмотрении стационарного нелинейного уравнения двойного синус-Гордона и соответствующей задачи Штурма–Лиувилля как единой системы уравнений и применении для численного решения этой системы модифицированных ньютоновских итераций в сочетании с алгоритмом численного продолжения по параметрам модели для перехода на новые ветви решений. Показано, что учет второй гармоники в разложении джозефсоновского тока приводит к изменению свойств известных статических распределений магнитного потока, а также к появлению новых однородных и флюксонных состояний. Исследована взаимосвязь сосуществующих (устойчивых и неустойчивых) распределений.

Совместно с коллегами из Болгарии микроскопический оптический потенциал (ОП) использован для расчета и сравнения с экспериментальными данными сечений упругого рассеяния $^{11}\text{Li} + p$ при энергиях 62, 68,4 и 75 МэВ/нуклон. Такой потенциал не содержит свободных параметров, однако допускается перенормировка глубины его вещественной и мнимой частей (рис. 5). При анализе данных также учитывалась известная тенденция зависимости объемных интегралов ОП от энергии. Исследована роль спин-орбитального взаимодействия, рассчитаны полные сечения реакций, которые предлагается получить в будущих экспериментах [27].

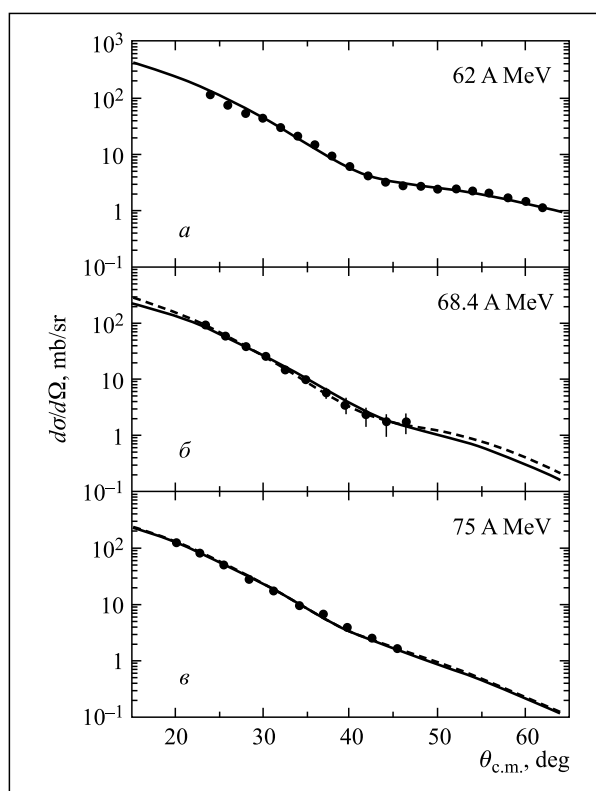


Рис. 5. Упругое рассеяние $^{11}\text{Li} + p$ при 62 (а), 68,4 (б) и 75 МэВ/нуклон (в) для ОП с рассчитанными коэффициентами перенормировки глубины вещественной и мнимой частей потенциала. Сплошные и штриховые кривые — расчет без учета и с учетом ls -взаимодействия соответственно

В работах [28] рассмотрены вопросы эволюции Вселенной в присутствии жидкости и темной энергии, где роль темной материи играет параметр уравнения состояния ω , зависящий от времени. Введение временной зависимости параметра ω связано с данными наблюдений, свидетельствующими о переходе Вселенной из режима замедленного расширения в ускоренный, что означает изменение значения ω

с положительного на отрицательное. Предложенные модели находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Совместно с коллегами из Румынии [29] продолжено изучение эволюции Вселенной в рамках модели

СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

31 января–3 февраля 2012 г. состоялась девятнадцатая междисциплинарная конференция «Математика. Компьютер. Образование» (МКО). Специфика этих конференций заключается в том, что они носят научно-образовательный, междисциплинарный характер, предоставляют возможность профессионального научного общения на секционных заседаниях и стендовых сессиях и дают возможность научной молодежи общаться с опытными учеными и преподавателями, обсуждать свои результаты. 19-я конференция МКО собрала более 380 участников, две трети из них — молодежь.

Традиционное двухдневное рабочее совещание по компьютерной алгебре проходило в ЛИТ ОИЯИ 23 и 24 мая. В нем приняли участие более 30 ученых, представляющих университеты и научные центры Бухареста (Румыния), Москвы, Санкт-Петербурга, Омска, Петрозаводска, Переславля-Залесского, Саратова, Тамбова и Дубны. Было представлено 28 докладов.

С 16 по 21 июля в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований проходила 5-я Международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании». Программа конференции включала не только вопросы, связанные с созданием и эксплуатацией грид-инфраструктур и грид-приложений, но и теоретические и практические аспекты применения распределенных вычислительных сред, распределенной обработки данных. В этом году повышенный интерес к конференции был связан с созданием в России центра обработки данных уровня Tier1 на базе ОИЯИ и НИЦ «Курчатовский институт» и активной деятельностью в области применения «облачных» вычислений. Конференция собрала 256 участников из 22 стран, а также из ЦЕРН и ОИЯИ. Россия была представлена участниками из 40 университетов и исследовательских центров. На конференции была организована работа ежедневных пленарных заседаний и восьми секций: грид-инфраструктуры, «облачные» вычисления и грид, грид-приложения, грид-системы из персональных компьютеров, системы распределенных информационных ресурсов, WLCG — всемирный грид для обработки данных с Большого

типа Бианки-I в присутствии космических струн и магнитной жидкости. Эта проблема была рассмотрена в рамках как классической теории, так и петлевой квантовой космологии. Проведено детальное сравнение полученных результатов.

адронного коллайдера в ЦЕРН, ГридННС — грид национальной нанотехнологической сети, распределенные вычисления (методы и алгоритмы) и стендовые доклады. В рамках конференции было проведено рабочее совещание по компьютерингу для эксперимента ATLAS на LHC. Состоялся семинар международной федерации грид-систем из персональных компьютеров (IDGF), совмещенный с практическими занятиями по этому направлению и обучение-введение в грид-технологии, которое было организовано для студентов и аспирантов, участников конференции из Монголии и Азербайджана. Важным событием на конференции стал круглый стол, посвященный созданию в России центра обработки данных уровня Tier1 для экспериментов на LHC.

С 22 по 27 августа в Объединенном институте ядерных исследований на базе профилактория «Ратмино» проходила международная молодежная конференция-школа «Современные проблемы прикладной математики и информатики», организованная под эгидой национального комитета Международного сообщества по промышленной и прикладной математике (SIAM) и международного координационного комитета по вычислительной математике академий наук стран СНГ. Организаторами конференции-школы выступили Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Лаборатория информационных технологий ОИЯИ, Институт вычислительной математики РАН, Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова. Проведение конференции-школы имело целью возрождение традиций школ по прикладной математике и математическому моделированию. Основной задачей конференции-школы являлось ознакомление молодых ученых, студентов и аспирантов с современными вычислительными методами, средствами и методами программирования, вычислительными платформами, а также с результатами математического моделирования различных систем в науке и технике. Конференция-школа собрала более 120 участников из России, Болгарии, Белоруссии, Вьетнама, Германии, Монголии, Словакии, Таджикистана, Украины, ЮАР. Россия была представлена участниками из Дубны, Москвы, Воронежа, Ярославля, Сарова и Новосибирска.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Oleynik D. et al.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 396. P. 032083.
2. *Belov S. et al.* // Ibid. P. 042036.
3. *Petrosyan A. et al.* // Ibid. P. 032082
4. *Кореньков В. В., Кутровский Н. А., Семенов Р. Н.* // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. Т. 4, №2. С. 339–344.
5. *Кореньков В. В., Нечаевский А. В., Трофимов В. В.* // Системный анализ в науке и образовании. 2012. №4.
6. *Lebedev S. et al.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 396. P. 022029.
7. *Акишина Т. П.* // Письма в ЭЧАЯ. 2012. Т. 9, №3(173). С. 440–462.
8. *Жабицкая Е. И. и др.* // Компьютерные исследования и моделирование. 2012. Т. 4, №3. С. 585–595.
9. *Zloказov V. B., Utyonkov V. K., Tsyganov Yu. S.* // Comp. Phys. Commun. 2013. V. 184, Iss. 2. P. 428–431.
10. *Жанлаев Т., Чулуунбаатар О.* // Вестн. РУДН. Сер. «Математика. Информатика. Физика». 2012. №1. С. 34–43.
11. *Пузынина Т. П., Тхак Во Чонг* // Вестн. РУДН. Сер. «Математика. Информатика. Физика». 2012. №4. С. 73–86.
12. *Friesen A. V., Kalinovsky Yu. L., Toneev V. D.* // Part. Nucl., Lett. 2012. V. 9, No. 1. P. 8–17.
13. *Galstyan A. G. et al.* // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. P. 023418-1-5.
14. *Balbutsev E. B., Molodtsova I. V.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 366. P. 012002(1-5).
15. *Kim H.-K. et al.* // Phys. Rev. A. 2012. V. 85. P. 022707-1-10.
16. *Podgainy D. V., Zaimidoroga O. A.* Relativistic Dynamics of a Charged Particle in an Electroscalar Field. 2012. arXiv:1203.2490
17. *Adam S., Adam Gh.* // LNCS. 2012. V. 7125. P. 189–194.
18. *Gerdt V. P.* // Ibid. P. 28–42.
19. *Gerdt V. P. et al.* // J. Symb. Comp. 2012. V. 47. P. 1233–1265;
Gerdt V. P., Hashemi A., Alizadeh B. M. // Вестн. РУДН. Сер. «Математика. Информатика. Физика». 2012. №2. С. 43–54.
20. *Гусев А. А. и др.* // ЯФ. 2012. Т. 75, №10. С. 1281–1297;
Gusev A. A. et al. // LNCS. 2012. V. 7442. P. 155–171;
Гусев А. А., Ростовцев В. А., Виницкий С. И. // Системный анализ в науке и образовании. 2012. №2. С. 01–14.
21. *Kornyak V. V.* // LNCS. 2012. V. 7125. P. 79–93;
Kornyak V. V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 343. P. 012059.
22. *Gerdt V. et al.* // Phys. Scripta. 2013. V. 153. P. 014026.
23. *Kniehl B. A., Tarasov O. V.* // Nucl. Phys. B. 2012. V. 854. P. 841.
24. *Саха Б.* // Вестн. РУДН. Сер. «Математика. Информатика. Физика». 2012. №4. С. 170–180.
25. *Saha B.* // Intern. J. Theor. Phys. 2012. V. 51. P. 1812–1837.
26. *Atanasova P. Kh., Zemlyanaya E. V., Shukrinov Yu. M.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2012. V. 393. P. 01202;
Atanasova P. Kh., Zemlyanaya E. V. // Lecture Notes in Computer Sciences (submitted).
27. *Лукьянов В. К. и др.* // ЯФ. 2012. Т. 75, №11.
28. *Saha B., Yadav A. K.* // Astrophys. and Space Sci. 2012. V. 341, Iss. 2. P. 651–656;
Saha B., Amirhashchi H., Pradhan A. // Ibid. V. 342, Iss. 1. P. 257–267;
Yadav A. K., Saha B. // Ibid. V. 337, Iss. 2. P. 759–765.
29. *Rikhvitsky V., Saha B., Visinescu M.* // Ibid. V. 339, Iss. 2. P. 371–377.