



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2014 г. Лабораторией информационных технологий в направлении «Сети, компьютеринг, вычислительная физика» проводились исследования по двум темам первого приоритета: «Информационно-вычислительная инфраструктура ОИЯИ» и «Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обработки и анализа экспериментальных данных». В рамках сотрудничества с другими лабораториями ОИЯИ ученые ЛИТ принимали участие в исследованиях по 25 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ. ЛИТ должна обеспечивать развитие сетевой и информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ для научно-производственной деятельности Института и стран-участниц ОИЯИ на базе современных информационных технологий. На базе Центрального информационно-вычислительного комплекса ОИЯИ (ЦИВК ОИЯИ) развивается многофункциональный

центр хранения, обработки и анализа данных, который призван обеспечить широкий спектр возможностей пользователям на основе входящих в него компонент: грид-инфраструктуры уровня Tier1 и Tier2 для поддержки экспериментов на LHC (ATLAS, ALICE, CMS, LHCb), FAIR (CBM, PANDA) и других масштабных экспериментов; вычислительного кластера общего назначения; инфраструктуры облачных вычислений; вычислительного гетерогенного кластера HybriLIT; учебно-исследовательской инфраструктуры для распределенных и параллельных вычислений. Каждая из этих компонент как имеет собственное оборудование, так и разделяет оборудование с другими компонентами центра, используя современные средства виртуализации.

В 2014 г. сотрудниками ЛИТ опубликованы 182 научные работы в реферируемых научных изданиях, представлено 36 докладов на международных и российских конференциях.

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ОИЯИ

В 2014 г. продолжались 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), вычислительный комплекс и базовое программное обеспечение, в том числе на основе облачных и грид-технологий, объединяющее информационно-вычислительные ресурсы Института в единую, доступную для всех пользователей среду.

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ. В 2014 г. поддерживалась надежная работа высокоскоростного канала связи Дубна–Москва. Для связи с научными сетями и сетью интернет использовались следующие каналы связи: LHCOPN/ЦЕРН (10 Гбит/с), RBnet (10 Гбит/с), E-арена и российские научные сети (10 Гбит/с), RUNet и международные научные сети (10 Гбит/с). Пропускная способность резервного канала связи составила 10 Гбит/с, и была

Таблица 1

Подразделение	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт
ЛФВЭ	72,71	36,58
ЛЯП	61,8	56,81
ЛНФ	50,27	56,84
ЛИТ	46,28	24,01
Серверы общего доступа	42,49	8,91
ЛРБ	25,22	1,25
ЛТФ	24,61	9,98
Управление	19,17	45,58
ЛЯР	18,07	4,12
Узел удаленного доступа (VPN)	15,87	4,5
ГРК	13,56	2,64
ОАО «НПК Дедал»	8,19	1,66
МСЧ-9	5,56	1,11
Университет «Дубна»	4,85	5,74
Санаторий-профилакторий «Ратмино»	4,2	1,29

Таблица 2

Научно-образовательные сети	Файлообмен (р2р)	Веб-ресурсы	Социальные сети	Программное обеспечение	Мультимедиа
93,04 %	4,18 %	1,5 %	0,65 %	0,63 %	0,01 %

улучшена его надежность за счет внедрения дополнительного маршрутизатора Cisco7606-S. Проработана возможность плавной модернизации внешнего канала до скорости 100 Гбит/с. Распределение входящего (превышающего 3 Тбайт) и исходящего трафика по подразделениям ОИЯИ в 2014 г. приведено в табл. 1. Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего назначения, Tier1, Tier2 и вычислительный комплекс, составил в 2014 г. 3,3 Пбайт (2,6 Пбайт в 2013 г.). Распределение входящего трафика по категориям приведено в табл. 2.

Создание Tier1-центра в ОИЯИ потребовало высокоскоростной надежной сетевой инфраструктуры с выделенным резервируемым каналом в ЦЕРН (LHCOPN). В 2014 г. Tier1 в ОИЯИ был включен в подсистему LHCOPN. Пропускная способность LHCOPN между Tier0 и Tier1 и между Tier1 и Tier1 составила 10 Гбит/с.

Локальная вычислительная сеть ОИЯИ. Продолжена работа по внедрению 10-гигабитной сети внутри лабораторий за счет перевода на 10-гигабитные оптические интерфейсы сетевого оборудования в зданиях и корпусах подразделений ОИЯИ. Для поддержки пользователей произведены плановые работы по усовершенствованию webmail, mail, проху и авторизационных сервисов. Проведена работа по переводу на единую авторизацию для веб-сервисов ОИЯИ с использованием протокола OAuth 2.0. В 2014 г. расширен список подключенных объектов ОИЯИ, находящихся за пределами площадок ОИЯИ. Произведено подключение единой системы международной академической вычислительной сети с прозрачным роумингом edu roam (education roaming), что позволило пользователям ОИЯИ подключаться к этой сети с использованием пароля, полученного в сетевой службе ОИЯИ.

ЛВС ОИЯИ содержит 7802 сетевых элемента и 12292 IP-адреса. На 2014 г. зарегистрировано 4057 пользователей сети, более 1500 пользователей сервиса mail.jinr.ru, 1416 пользователей электронных библиотек и 861 пользователь сервиса удаленного доступа.

Многофункциональный центр хранения, обработки и анализа данных. В настоящее время в ЛИТ начато создание многофункционального центра хранения, обработки и анализа данных в ОИЯИ. Центр развивается на базе ЦИВК ОИЯИ и призван расширить набор вычислительных сервисов, предоставляемых пользователям.

В настоящий момент основной вычислительный кластер состоит из 2560 64-битных процессоров и системы хранения данных общей емкостью 1800 Тбайт. Центральный маршрутизатор сети кластера соединен с основным маршрутизатором сети ОИЯИ на скорости 10 Гбит Ethernet.

Реализована новая версия системы мониторинга вычислительного комплекса ОИЯИ. В соответствии с целями и задачами создан базовый функционал системы мониторинга, который позволяет службе операторов вести наблюдение за вычислительными ресурсами и их обеспечением в реальном времени.

Вычислительные средства и системы хранения информации управляются базовым программным обеспечением, позволяющим использовать вычислительные ресурсы и системы хранения как в международных проектах для распределенных вычислений (WLCG, FUSION, BIOMED, HONE, PANDA, CBM, BES, NICA/MPD и др.), так и в интересах локальных пользователей ОИЯИ. Все вычислительные мощности доступны и пользователям ОИЯИ, и пользователям грид через единую систему пакетной обработки задач.

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. Две 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 защиты данных RAID6. На рис. 1 приведены распределения использования ресурсов вычислительного кластера.

В табл.3 дана статистика использования вычислительного кластера в 2014 г. подразделениями Института и группами пользователей, за исключением пользователей грид-среды.

Грид-среда ОИЯИ. В 2014 г. продолжалась работа в рамках крупномасштабных грид-проектов: «Всемирный вычислительный грид для LHC» (WLCG, <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>), «Европейская грид-инфраструктура» (EGI-InSPIRE — Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for

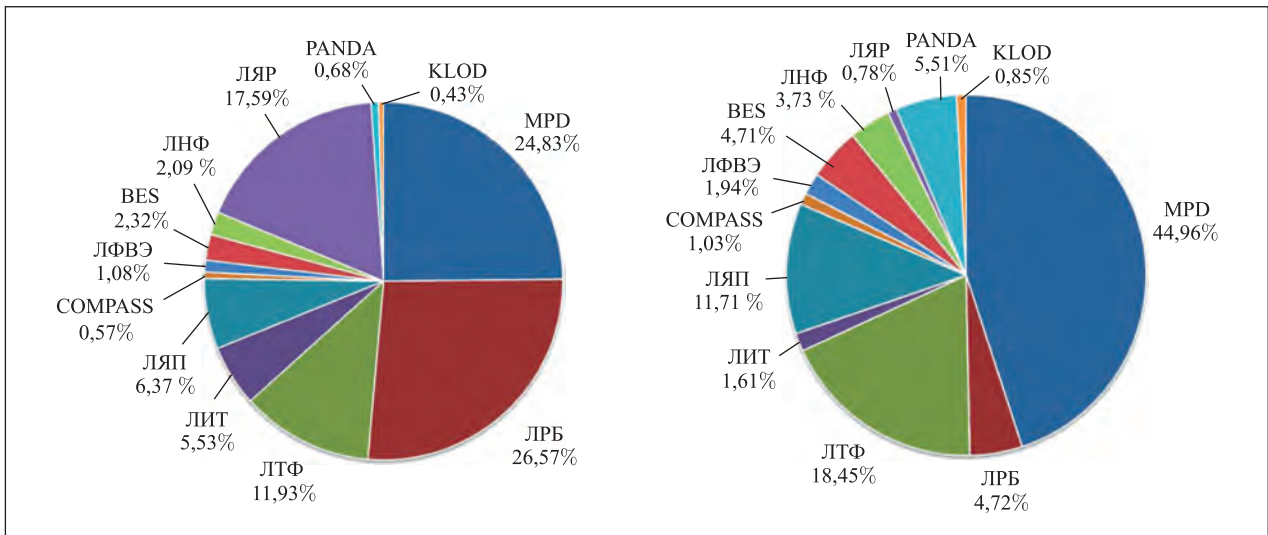


Рис. 1. Распределение по процессорному (слева) и по астрономическому времени (справа) ресурсов вычислительного кластера между подразделениями Института и группами пользователей

Таблица 3

Лаборатория/ группа	Число заданий	Процессорное время, kSi2K · ч	Астрономическое время, kSi2K · ч
ЛРБ	893701,32	89251,84	1158
МРД	835048,52	850393,16	64120
ЛЯР	591555,74	14687,34	362
ЛТФ	401326,39	348956,78	9319
ЛЯП	214328,90	221485,29	8310
ЛИТ	185922,76	30508,33	468
ВЕС	78183,51	89081,31	32511
ЛНФ	70211,33	70570,20	392
ЛФВЭ	36165,57	36715,10	1233
PANDA	22936,75	104304,17	360753
КОМПАСС	19167,64	19403,42	2582
KLOD	14601,20	16101,93	4368

Researchers in Europe, <http://www.egi.eu/projects/egi-inspire/>). Вычислительный кластер ОИЯИ, как грид-сайт JINR-LCG2 глобальной грид-инфраструктуры, поддерживает вычисления восьми виртуальных организаций (ВО) (alice, atlas, biomed, cms, dteam, fusion, hone, lhcb), а также предоставляет возможность использования грид-ресурсов для экспериментов BES и PANDA. Основными пользователями грид-ресурсов ОИЯИ являются виртуальные организации всех экспериментов на LHC.

Серверы системы управления загрузкой кластера используются для распределения задач (локальных пользователей и WLCG) для различных сайтов 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 ALICE,

ATLAS, CMS, LHCb и BES, которое установлено на серверах в ЦЕРН. Два VObox (Virtual Organization box) используются коллаборациями ALICE и CMS для обеспечения своей работы на сайтах WLCG.

Для обслуживания грид-сайта в ОИЯИ установлено 22 сервера с ПО промежуточного уровня EM12/EM13 проекта WLCG. Кроме функций поддержки работы самого сайта JINR-LCG2, часть серверов реализует важные сервисы и функции поддержки российского грид-сегмента проекта WLCG. В табл.4 и на рис.2 (слева) приведены данные по использованию в 2014 г. грид-инфраструктуры ОИЯИ виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI. В 2014 г. на этом сайте было выполнено около 5 млн задач, затраты процессорного времени при этом составили около 160 млн ч в единицах HEPSpec06. Сайт ОИЯИ — один из наиболее эффективных сайтов уровня Tier2 в инфраструктуре WLCG.

Таблица 4

ВО	Процессорное время, HEPSpec06 · ч	Число заданий
atlas	41 876 104	2 677 075
cms	46 230 972	1 003 803
alice	45 093 312	786 849
lhcb	21 135 604	141 346
biomed	1 650 056	237 252
bes	300 552	40 456
hone	266 944	20 016
fusion	46 348	16 624
ops	572	80 438
Всего	156 600 464	5 003 859

В Лаборатории информационных технологий создан центр уровня Tier1 для эксперимента CMS. В настоящий момент Tier1 состоит из 1200 64-битных процессоров системы хранения объемом

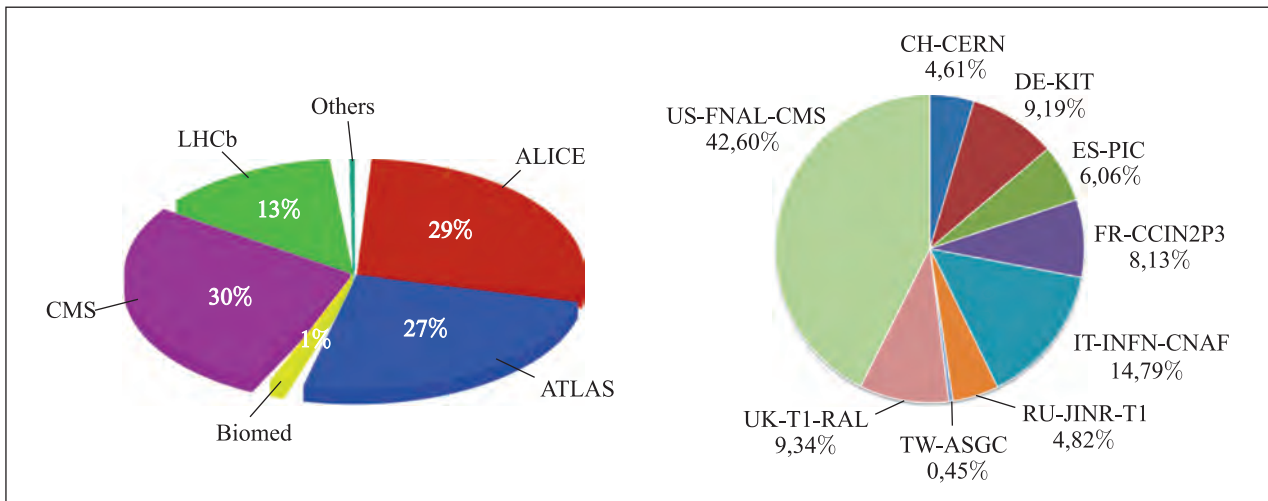


Рис. 2. Распределение объема использования грид-инфраструктуры ОИЯИ уровня Tier2 виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI (слева). Использование Tier1-центров экспериментом CMS (справа)

660 Тбайт и ленточной системы хранения на 72 Тбайт. В 2014 г. на Tier1-сайте ОИЯИ было выполнено более 1 млн задач, затраты процессорного времени при этом составили около 65 млн ч в единицах HEPSpec06. На рис. 2 (справа) приведены данные по использованию Tier1-центров экспериментом CMS. Вклад Tier1-центра ОИЯИ составил 4,82 %.

К началу нового сеанса на ЛHC необходимо закончить построение первой очереди полнофункционального Tier1-центра в ОИЯИ. Для этих целей установлен ленточный робот фирмы IBM емкостью 5 Пбайт, на стадии завершения работы по вводу в эксплуатацию источников бесперебойного питания и системы межрядного кондиционирования для нового модуля Tier1.

В 2014 г. была продолжена работа по интеграции параметров сетевых соединений между сайтами инфраструктуры коллаборации ATLAS в процессы принятия решений системы обработки задач PanDA (Production and Distributed Analysis System). В частности, был создан сервис, который переносит только необходимые данные из ATLAS SSB (Site Status Board), в которой хранятся как текущая информация, так и исторические данные в AGIS (ATLAS Grid Information System), являющейся единой информационной системой для всех систем коллаборации ATLAS. Также в 2014 г. разработан сервис, переносящий сетевые метрики, а также дополнительную информацию во внутреннюю информационную систему PanDA-SchedConfig. SchedConfig является базой данных, содержащей конфигурационные параметры, необходимые для работы PanDA, частичное дублирование сделано для того, чтобы в случае недоступности информационной системы AGIS PanDA сохраняла работоспособность [1].

Вычислительный кластер с гетерогенной архитектурой HybriLIT. В 2014 г. введен в эксплуатацию вычислительный кластер HybriLIT (<http://hybrilit.>

jinr.ru), содержащий четыре вычислительных узла: два узла с тремя графическими ускорителями NVIDIA Tesla K40 (Atlas) в каждом, узел с двумя сопроцессорами Intel Xeon Phi 7120P, а также узел, содержащий NVIDIA Tesla K20x и сопроцессор Intel Xeon Phi 5110P. Все вычислительные узлы содержат по два процессора Intel Xeon E5-2695v2. В состав кластера HybriLIT дополнительно входят управляющий узел и узел хранения данных. На рис. 3 представлена структура и основные характеристики кластера HybriLIT. Включение кластера HybriLIT в собственную вычислительную инфраструктуру многофункционального центра хранения, обработки и анализа данных предоставляет возможность сотрудникам Института и ученым из стран-участниц ОИЯИ выполнять расчеты с использованием ускорителей вычислений, создавать собственное программное обеспечение для проведения исследований, требующих ресурсоемких расчетов, а также использовать уже адаптированные для гибридных архитектур пакеты программ и математических библиотек. На базе кластера HybriLIT проведены обучающие курсы по технологиям параллельного программирования в рамках конференции GRID'2014, в рамках Международной молодежной конференции MPAMCS'2014 и в рамках школы «The Helmholtz International Summer School “Lattice QCD, Hadron Structure and Hadronic Matter” 2014». В работе учебных курсов приняли участие более 60 человек из Германии, Монголии, России, Румынии и др.

В настоящий момент сотрудниками ЛИТ совместно с сотрудниками Института экспериментальной физики и Технического университета в Кошице (Словакия) для эффективного использования гетерогенного кластера HybriLIT создается и внедряется информационно-программная среда, включающая удобные сервисы для разработки, отладки и профилирования параллельных приложений.

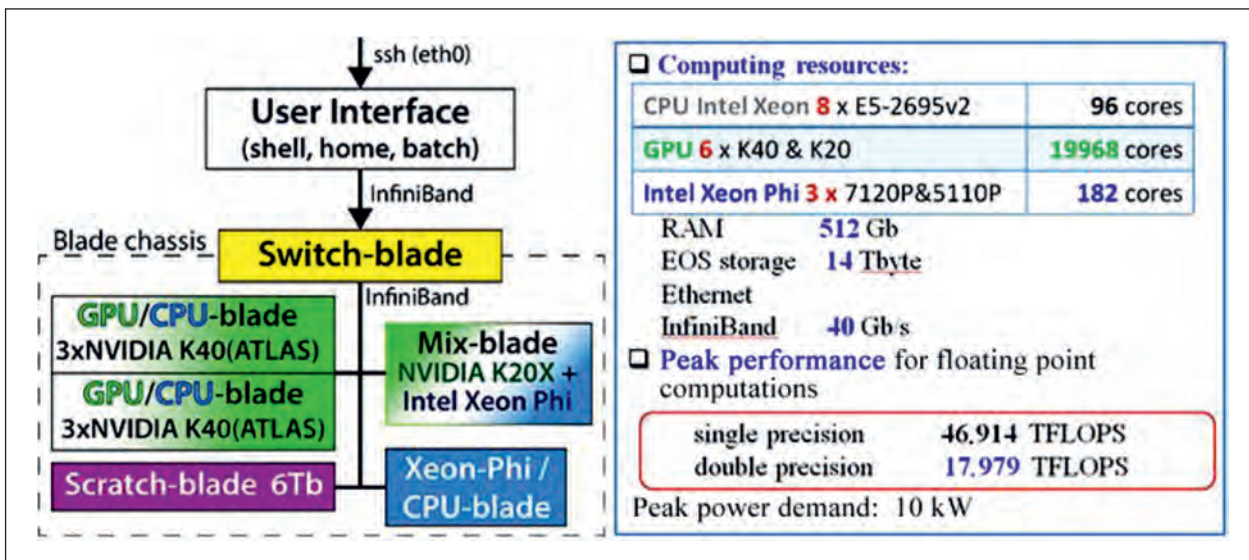


Рис. 3. Структура гетерогенного вычислительного кластера HybriLIT (слева). Основные параметры вычислительных элементов кластера и его производительность (справа)

Облачная среда. В начале 2014 г. введена в эксплуатацию облачная инфраструктура ОИЯИ (<http://cloud.jinr.ru>). На 2014 г. ресурсы облачной среды составили 138 ядер, 260 ГБ ОЗУ и 10 ТБ дискового пространства. В настоящий момент в облаке зарегистрировано 67 учетных записей.

Ресурсы облачного сервиса используются для различных работ в рамках тем Проблемно-тематического плана, а также для выполнения обязательств ЛИТ и ОИЯИ по различным проектам. В облачной инфраструктуре создано:

- два полигона на базе ППО PanDA: один — для разработки, второй — для оценки его пригодности для построения компьютеринг-инфраструктуры проекта NICA;
- полигон на базе ППО DIRAC для эксперимента BES-III и счетные ресурсы для него;
- тестовые экземпляры сервисов по управлению проектами (JPMS) и сервера документов (JDS).

На рис. 4 приведено распределение облачных ресурсов между лабораториями и группами ОИЯИ за 2014 г.

Выполнена миграция сервисов учебно-исследовательской и тестовой грид-инфраструк-

туры на виртуальные машины в облачный сервис ОИЯИ.

На VOMS-сервере учебно-исследовательской грид-инфраструктуры создана виртуальная организация NICA для проведения соответствующих исследовательских работ по одноименному проекту.

Информационная и программная поддержка. В 2014 г. разработана новая система моделирования грид- и облачных сервисов, ориентированная на повышение эффективности разработки системы хранения и обработки данных ускорительного комплекса NICA. В системе реализован подход учета качества работы уже функционирующей системы при проектировании ее дальнейшего развития за счет объединения самой программы моделирования с системой мониторинга реального грид-облачного сервиса через специальную базу данных [2].

Проведен сравнительный анализ пакетов моделирования облачных инфраструктур: CloudSim, iCanCloud, CReST. Эти программные пакеты позволяют создавать модели облачных систем с определенной функциональностью и конфигурацией. Результатом работы готовой модели является статистическая

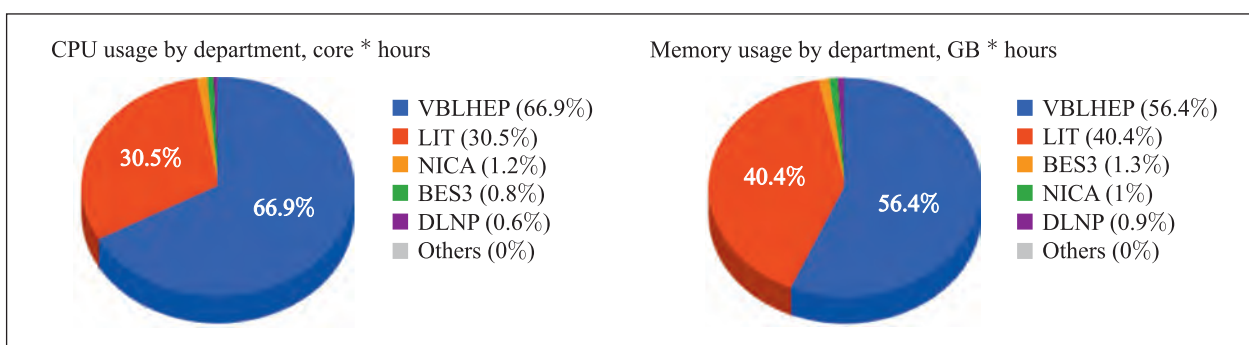


Рис. 4. Распределение облачных ресурсов между лабораториями и группами ОИЯИ за 2014 г.

информация по наиболее важным характеристикам облачных инфраструктур: времени выполнения задач, жизненному циклу виртуальных машин, использованию ресурсов. Анализируя эту информацию, разработчик может выявить узкие места в модели и предусмотреть их устранение решением, верность которого можно проверить следующей итерацией симуляции [3].

Разработаны подходы для обеспечения интеграции контента и интероперабельности информационных систем, сопровождающих научные исследования в ОИЯИ, а именно: сервера научных документов JINR Document Server (JDS), информационно-аналитической системы «Персональная Информация о сотрудниках ОИЯИ»/Personal Information (PIN) и системы управления мероприятиями Indico [4].

В течение 2014 г. продолжались работы по переходу на единую информационную платформу 1С 8.2 УПП: произведена интеграция 1С 8.2 УПП и ADB2 в части оперативного исполнения бюджета ОИЯИ; разработан специализированный конструктор по многострочным документам; запущен в эксплуатацию модуль «Бюджетирование», в том числе «Заявочный механизм». Также в течение 2014 г. проводилось обучение пользователей, в частности, осуществлено обучение новому функционалу «взаиморасчеты с хозрасчетными подразделениями». Регулярно проводились еженедельные встречи с пользователями из бухгалтерии для выявления проблем, возникающих при работе с 1С, и решения оперативных задач.

В 2014 г. была проведена настройка системы электронного документооборота (СЭД) «1С: Документооборот», был запущен в промышленную эксплуатацию документ «Договор подряда» с соответствующими схемами электронного согласования, а также подготовлены необходимые инструкции пользователей и проведено обучение пользователей по созданию и согласованию документов «Договор подряда» в СЭД «1С: Документооборот».

В 2014 г. выполнялись работы по корректировке планов проекта в информационной системе управления проектом NICA (ADB2-EVM), была подготовлена отдельная версия модуля ART-EVM в ЦЕРН, проведена интеграция функционала ART-EVM с информационной системой (ИС) управления проектом NICA (ADB2-EVM), осуществлено развертывание ART-EVM на площадке в ОИЯИ и произведено

тестирование функционала интеграции с информационной системой управления проектом NICA. В рамках развития ИС управления проектом NICA осуществлена разработка функционалов: по работе с базовыми планами (baselines), по вводу показателей освоенного объема (EV), системе уведомлений; проведено тестирование отчетных форм в ADB2-EVM; осуществлена синхронизация справочников иерархической структуры работ (WBS) между ИС управления проектом NICA (ADB2-EVM) и 1С. Также в 2014 г. проводилась модернизация и шло развитие функционала по сверке фактических данных по оплате счетов/заказов 1С и ADB2 и обучение руководителей 1-го и 2-го уровней WBS по работе с системой ADB2-EVM.

В течение 2014 г. продолжались работы по актуализации программной среды и баз данных информационных сайтов ЛИТ и ОИЯИ — <http://lit.jinr.ru>, <http://www.jinr.ru>, <http://wwwinfo.jinr.ru> и др. Также осуществлялось создание и хранение электронных документов, связанных с научной и административной деятельностью ЛИТ и Института, — по представлению научно-организационного отдела ОИЯИ (информация о работе базовых установок, о сессиях Ученого совета ОИЯИ и т. д.), был организован интернет-доступ к соответствующей информации: о премиях ОИЯИ — поисковая система (данные с 1960 г.) http://wwwinfo.jinr.ru/search_award_dbs.htm; о конференциях, рабочих совещаниях ОИЯИ (<http://wwwinfo.jinr.ru/confer-e.htm>); о диссертационных советах ОИЯИ (http://wwwinfo.jinr.ru/dissertation/JINR_DCs.htm) и объявлениях о защите кандидатских (докторских) диссертаций в ОИЯИ (http://wwwinfo.jinr.ru/announce_disser.htm) — по представлению ученых секретарей советов. В 2014 г. проводились работы по сопровождению и модернизации веб-портала журналов «Физика элементарных частиц и атомного ядра» (ЭЧАЯ) и «Письма в ЭЧАЯ»: <http://pepan.jinr.ru/>. Традиционно осуществлялись разработки, создание и поддержка специализированных информационных веб-сайтов, сайтов различных конференций, совещаний, симпозиумов а также выполнена организация хостинга веб-сайтов по заявкам лабораторий ОИЯИ (ЛНФ им. И. М. Франка — CMR@IBR-2, ЛЯП им. В. П. Джелепова — RCRC-2014, ЛЯР им. Г. Н. Флерова — EXON-2014, ЛРБ — MPGRRE-2015, ЛИТ — RCDL-2014 и др.).

МЕТОДЫ, АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ, МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Одним из основных направлений деятельности ЛИТ является обеспечение математической алгоритмической и программной поддержки эксперимен-

тальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. Ниже дана краткая информация о некоторых из полученных результатов.

Разработан новый алгоритм построения сегментов в камерах торцевой части установки CMS на Большом адронном коллайдере. С использованием программы, специально созданной для нахождения некоторых до сих пор недоступных для анализа параметров симулированных МК-объектов был проведен анализ результатов, полученных с помощью разных алгоритмов, и доказано значительное превосходство нового алгоритма над стандартным как для частиц, полученных при соударении пучков, так и для космических лучей.

В рамках работы по проектированию и оптимизации установки проекта «Baryonic Matter at Nucleon» (BM@N) выполнен ряд мероприятий, в частности, проведен анализ данных, полученных с прототипа GEM-детектора, в ходе которого рассчитана эффективность и ряд других параметров работы детектора. Результаты анализа переданы специалистам для последующей коррекции геометрии прототипа. Разработан и передан для внедрения в базовый программный пакет эксперимента код для считывания информации, полученной с GEM-детектора. Рассчитана эффективность DC-детектора при низких значениях электрического напряжения, а также создано программное обеспечение для работы с данными, полученными с восьми плоскостей детектора.

На основе фильтра Калмана разработан алгоритм реконструкции траектории заряженных частиц в режиме реального времени эксперимента CBM (GSI, Дармштадт, Германия). Задачи реконструкции траекторий заряженных частиц требуют привлечения высокопроизводительных вычислительных ресурсов, в связи с этим программная реализация предложенного алгоритма осуществлялась на основе различных технологий параллельного программирования, адаптированных к гибридным вычислительным архитектурам. Для численного решения рассматриваемой задачи использовался гибридный сервер ЛИТ с двумя центральными процессорами Intel Xeon X5660 и графической картой NVIDIA GTX 480 [5].

Сотрудниками ЛИТ и ЛФВЭ, участниками коллаборации Geant4, выполнена работа «Эффект подавления *uu*-дикварков при расщеплении протонов в монте-карловских генераторах событий». Большинство монте-карловских генераторов событий множественного рождения предполагают, что нуклоны расщепляются на кварки и дикварки в сильных взаимодействиях. В частности, протоны расщепляются на *ud*-дикварк и *u*-кварк с вероятностью $2/3$ и на *uu*-дикварк и *d*-кварк с вероятностью $1/3$. В работе показано, что использование для последней вероятности значения $1/6$ позволяет описать на количественном уровне данные NA49 по реакциям $p + p \rightarrow p + X$ при $158 \text{ ГэВ}/c$. Подавленный вес *uu*-дикварков в протонах ожидается в инстантонной модели вакуума КХД. Согласно этой модели взаимодействие кварков зависит от их «ароматов». Например, взаимодействие отлично от нуля для квар-

ков с разными «ароматами». Поэтому *uu*-дикварки должны быть подавлены в протонах. Для моделирования реакций $p + p \rightarrow p + X$ использовалась модель Fritiof (FTF) Geant4. Были получены хорошие результаты. Указанное подавление дикварков включено в последнюю версию Geant4 [6].

Разработана программа ROTHEA на языке ФОРТРАН-77 для расчета с заданной точностью собственных значений, поверхностных собственных функций и их первых производных по параметру параметрического самосопряженного двумерного эллиптического дифференциального уравнения с условиями Дирихле и/или Неймана в конечной двумерной области. Программа вычисляет также потенциальные матричные элементы — интегралы от произведения поверхностных функций и/или первых производных от поверхностных функций по параметру. Собственные значения, зависящие от параметра и матричных элементов, вычисленные программой ROTHEA, могут быть использованы для решения с помощью программы KANTBP задач на связанные состояния и многоканальных задач рассеяния для систем связанных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка [7].

Проведен анализ сечений неупругого рассеяния π -мезонов ядрами Si, Ni, Pb при энергии 291 МэВ на основе микроскопического оптического потенциала (ОП). Эти ОП определялись на основе пион-нуклонной амплитуды и распределения плотности ядра. При этом использовались параметры πN -амплитуды в ядерной среде, полученные ранее из анализа данных упругого рассеяния на тех же ядрах. Расчет сечений велся на основе релятивистского волнового уравнения. Из сравнения с экспериментом сечений неупругого рассеяния получены параметры деформации ядер [8].

Разработан метод и комплекс программ для численного моделирования процесса формирования поляронных состояний в конденсированных средах. Проведено численное исследование этого процесса для водной среды при воздействии лазерного облучения в ультрафиолетовом диапазоне. Показано, что в рамках предложенного подхода удается численно воспроизвести экспериментальные данные по формированию фотовозбужденных гидратированных электронов. Представлена схема численного решения системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных, описывающих динамическую модель полярона. Программная реализация выполнена с использованием технологии параллельного программирования MPI [9].

Экспериментальным путем из исследования поведения критической температуры T_c при постепенном замещении ионов Cu^{2+} в плоскости CuO_2 двухвалентными металлическими ионами M^{2+} получено прямое доказательство роли плоскостей CuO_2 в возникновении высокотемпературной сверхпроводимости в купратах. Функциональные зависимо-

сти T_c от содержания y в ионе M $T_c = T_c(y)$ выводятся из имеющихся экспериментальных данных по $\text{La}_{1,85}\text{Sr}_{0,15}\text{Cu}_{1-y}\text{M}_y\text{O}_4$ (LSCO) для M^{2+} , обозначающего Zn^{2+} или Ni^{2+} . Обработка данных и проведенный анализ в обоих случаях указывают на резкое линейное уменьшение T_c при увеличении y с наклоном, зависимым от иона M . Этот результат обосновывает основную гипотезу эффективной двумерной двухзонной модели Хаббарда (Plakida N. M. et al. // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 16599; Eur. Phys. J. B. 2013. V. 86. P. 115; Плакида Н. М. и др. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124, №2. С. 367; Plakida N. M. High-Temperature Cuprate Superconductors. Experiment, Theory, and Applications, 2nd Ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 2010) поиска происхождения высокотемпературной сверхпроводимости в купратах внутри отдельных плоскостей CuO_2 [10].

Впервые получены формулы для коэффициентов многочленов, представленных в виде базисных элементов (МБЭ), зависящих от параметров трехточечной сетки. Применение МБЭ-многочленов высоких степеней для кусочно-полиномиальной аппроксимации и сглаживания улучшает качество аппроксимации и существенно повышает эффективность алгоритмов обработки данных [11].

Для описания подпространств сепарабельных и перепутанных состояний были использованы методы вычислительной теории инвариантов и компьютерной алгебры. В частности, исследованы двухкубитные системы и трехуровневые квантовые системы (кутриты). Было показано, что пространство состояний полностью является полуалгебраическим множеством (т.е. набором полиномиальных уравнений и неравенств), задаваемым полиномиальными инвариантами глобальной унитарной группы — $SU(4)$ для двухкубитных систем и $SU(3)$ для кутритов [12].

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В 2014 г. совместно с китайскими коллегами проводилась разработка системы распределенных вычислений для эксперимента BES-III (Beijing Spectrometer III) на электрон-позитронном коллайдере в Пекине. Для системы распределенных вычислений эксперимента BES-III была выбрана инфраструктура DIRAC (Distributed Infrastructure with Remote Agent Control), позволяющая реализовать требуемые функциональные возможности. Сотрудники ЛИТ активно участвуют в решении всех задач развития GRID-системы для эксперимента BES-III, особенно в разработке систем управления данными и GRID-мониторингом. В 2014 г. достигнут большой прогресс в создании инфраструктуры хранения данных, а также разработана и внедрена первая версия системы мониторинга для BES-III.

На основе метода конечных элементов проведено численное моделирование распределения токов и магнитных полей в сверхпроводнике с переменным током, позволяющее определить потери энергии в сверхпроводнике и, таким образом, оптимизировать его конструкцию. Для токов 2–5 кА (по амплитуде) передающий кабель может состоять из сравнительно небольшого числа элементов MgB_2 . Его эффективность существенно зависит от распределения токов и магнитных полей, которые, в свою очередь, формируются в зависимости от числа и упорядочивания сверхпроводящих компонент внутри кабеля, а также от магнитных свойств сопутствующих материалов. Численное моделирование позволяет тестировать различные конфигурации кабеля и таким образом получать информацию, необходимую для оптимизации его конструкции. При моделировании учитывалась зависимость критического тока от магнитной индукции и нелинейных свойств магнитных материалов [13].

В рамках самосогласованной теории среднего поля изучен однородный бозе-газ твердых сфер. Показано, что предложенный подход аккуратно описывает основное состояние бозе-газа для произвольных сильных взаимодействий и хорошо согласуется с вычислениями по методу Монте-Карло. Поскольку все другие приближения среднего поля работают только для очень малых параметров газа, предложенная самосогласованная теория представляет собой уникальный метод описания бозе-систем с произвольными параметрами газа [14]. Также показано, что предложенная самосогласованная теория среднего поля является единственным вариантом теории среднего поля, правильно предсказывающей фазовый переход второго рода в бозе-системах с атомными взаимодействиями произвольной силы в отличие от других вариантов, предсказывающих переход первого рода [15].

В рамках коллаборации с Университетом Кейптауна (ЮАР) и Университетом Пловдива (Болгария) в ЛИТ ОИЯИ проведено численное исследование комплексов локализованных структур в двух динамических системах, каждая из которых имеет множество физических приложений. Первая система описывается нелинейным уравнением Шредингера с внешней накачкой и диссипацией (NLS), вторая — уравнением двойного синус-Гордона (2SG). Численный анализ в обоих случаях основан на продолжении соответствующих стационарных решений по параметрам и численном решении линеаризованной задачи на собственные значения для анализа устойчивости и бифуркаций. Для первой системы продемонстрировано существование устойчивых и неустойчивых мультисолитонных структур в случае малой дисси-

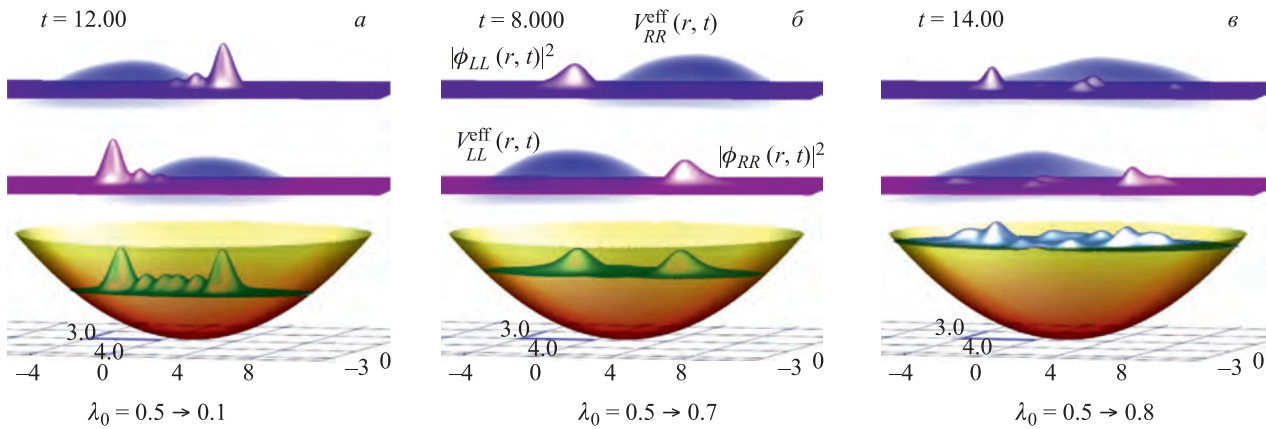


Рис. 5. Визуализация концепции индуцированных временизависимых барьеров в двумерном случае. Эволюция фрагментированных бозонных систем, активированная резким смещением внешнего гармонического потенциала (ловушки) $V(x, y) \rightarrow V(x - 1,5, y - 0,5)$ с одновременным изменением параметра межчастичного взаимодействия: *a*) сильное уменьшение межчастичного отталкивания $\lambda_0 = 0,5 \rightarrow 0,1$, решение на временном слое $t = 12$; *б*) умеренное возрастание $\lambda_0 = 0,5 \rightarrow 0,7$, решение на временном слое $t = 8$; *в*) сильное возрастание $\lambda_0 = 0,5 \rightarrow 0,8$ при $t = 14$

пации. Для второй системы свойства мультифлюксонных решений 2SG исследованы в зависимости от параметра второй гармоники. Показано, что учет второй гармоники приводит к изменению свойств известных решений и появлению новых сосуществующих флюксонных состояний. Полученные результаты применимы к модели длинных джозефсоновских контактов [16].

В сотрудничестве со словацкими коллегами разработан алгоритм моделирования процесса теплопроводности при проектировании и оптимизации криогенной ячейки, импульсно подающей рабочие газы (в миллисекундном диапазоне) в электронно-струнный источник высокозарядных ионов. Создана модель криогенной ячейки с четырьмя слоями (материалами). Для ускорения расчетов разработан параллельный алгоритм, реализованный на языке OpenCL. Результаты расчетов показывают, что выбранные характеристики и конфигурация устройства удовлетворяют необходимым требованиям к режиму его работы [17].

В рамках сотрудничества между группой по теории многочастичных бозонных систем Центра квантовой динамики Гейдельбергского университета и

Лабораторией информационных технологий ОИЯИ продолжены работы по теоретическому исследованию динамических свойств квантовых систем, реализованных на основе сверххолодных атомов и молекул, находящихся во внешних магнитооптических потенциалах (ловушках). В частности, продолжалась дальнейшая разработка и оптимизация пакета MCTDHB (The Multiconfigurational Time-Dependent Hartree for Bosons package), реализующего одноименный метод численного решения многочастичного нестационарного уравнения Шредингера. Разработанные для пакета MCTDHB программные модули предназначены для проведения 1D-, 2D-, 3D-расчетов на гибридных вычислительных системах, включающих в себя многоядерные CPU и графические ускорители. Параллельные модули реализованы на основе современных технологий параллельного программирования MPI + CUDA (MPI + PGI CUDA). Примеры результатов расчетов пакета MCTDHB приведены на рис. 5.

Разработка, оптимизация и предварительные расчеты проводились на гетерогенном вычислительном кластере HybriLIT (ЛИТ ОИЯИ) и гибридном кластере K100 (ИПМ им. М. В. Келдыша) [18].

СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

С 3 по 8 февраля в Объединенном институте ядерных исследований прошла XXI Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Наряду с ЛИТ ОИЯИ и Международным университетом «Дубна» организаторами конференции стали МГУ им. М. В. Ломоносова, Пушинский центр биологических исследований, Научный совет

РАН по биологической физике, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Центр национального интеллектуального резерва МГУ, фонд «Национальное интеллектуальное развитие», межрегиональная общественная организация «Женщины в науке и образовании». Традиционно проведены презентация и обсуждение исследовательских проектов

учащихся средних образовательных учреждений в рамках проекта «ФОРОС», которые были организованы в университете «Дубна». Ученики приехали из Москвы, Подмосковья, Твери, Ижевска. Для учащихся, которые не смогли приехать в Дубну, был организован телемост.

Очередное двухдневное рабочее совещание по компьютерной алгебре проходило в ЛИТ ОИЯИ 21–22 мая 2014 г. В нем приняли участие более 40 ученых из университетов и научных центров Бухареста, Софии, Тбилиси, Москвы, Санкт-Петербурга, Иванова, Переславля-Залесского, Петрозаводска, Саратова, Тамбова и Дубны. Было представлено 34 доклада.

Участники ознакомились с рядом новых многообещающих результатов по исследованию и решению алгебраических, дифференциальных и разностных уравнений, по повышению вычислительной эффективности алгоритмов компьютерной алгебры, по исследованию алгебраических свойств запутанных состояний кубитов в квантовой информатике, а также по приложениям компьютерной алгебры в физике и математике.

С 30 июня по 5 июля в Лаборатории информационных технологий проходила шестая международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании». Исполнилось десять лет со дня проведения первой конференции в 2004 г. Стоит отметить, что за эти десять лет конференция превратилась в уникальный форум для обсуждения широкого спектра вопросов, связанных с использованием распределенных и грид-технологий в различных областях науки, образования, промышленности и бизнеса, а также обмена новыми идеями и свежими результатами. В работе конференции приняли участие около 200 ученых из научных центров Армении, Белоруссии, Болгарии, Венгрии, Монголии, Румынии и других стран. Россия была представлена участниками из более чем 30 университетов и исследовательских центров. В рамках конференции была организована работа восьми секций, на которых обсуждалась текущая и будущая роль грид-технологий, добровольных вычислений, облачных технологий, BigData в моделях компьютеринга для мегапроектов в России и мире, таких как NISA и FAIR. Также в рамках конференции было проведено рабочее совещание «Computing models, Software and Data Processing for the future HENP experiments». Всего на конференции заслушано 30 пленарных, свыше 65 секционных и рассмотрено 13 стендовых докладов. В рамках конференции проведены двухнедельные обучающие курсы по технологиям параллельного программирования. Участники из Монголии, Румынии и России заслушали лекции по вопросам, касающимся таких технологий, как MPI, OpenMP, CUDA и OpenCL, практические занятия были проведены на базе гетерогенного вычислительного кластера HybrilIT (<http://hybrilit.jinr.ru/>).

С 25 по 29 августа 2014 г. под эгидой национального комитета Международного сообщества по промышленной и прикладной математике, международного координационного комитета по вычислительной математике академий наук стран СНГ проходила международная молодежная конференция «Современные проблемы прикладной математики и информатики» (MPAMCS'2014). Организаторами конференции выступили ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, ЛИТ ОИЯИ, ИВМ РАН, НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова. Конференция собрала участников из России, Белоруссии, Таджикистана, Армении, Монголии, Словакии и др. Общее число участников составило 132 человека, из них 108 человек — студенты, аспиранты, молодые ученые в возрасте до 35 лет включительно (более 80 % от общего числа участников). На конференции молодые ученые смогли ознакомиться с современными методами и подходами к решению задач науки и техники на высокопроизводительных вычислительных системах, с методами разработки больших комплексов программ, с современными технологиями параллельного программирования, а также с последними достижениями в области эксафлопсных вычислений и Big Data. Лучшие доклады молодых ученых опубликованы в журнале «Математическое моделирование».

С 13 по 16 октября 2014 г. в Дубне проходила очередная, 16-я конференция в серии ежегодных научных конференций «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» — RCDL-2014. Наряду с докладами российских участников из Москвы, Санкт-Петербурга, Казани, Ярославля и др. — сотрудников научно-исследовательских институтов, преподавателей и аспирантов вузов, специалистов библиотечного дела и индустрии информационных технологий — на конференции RCDL-2014 были представлены также доклады ученых из Великобритании, Индии, Казахстана и Франции. На заседаниях 14 секций конференции заслушано 28 докладов и 19 сообщений. По традиции, установившейся в последние годы, в рамках конференции проведен диссертационный семинар молодых ученых, на котором обсуждались направления и результаты научных исследований, выполняемых авторами представленных на семинар докладов.

При поддержке ЛИТ ОИЯИ, ЦЕРН и НИЯУ «МИФИ» с 20 по 24 октября 2014 г. прошла пятая школа по информационным технологиям «Грид и административно-управленческие системы ЦЕРН». Пятая школа была посвящена вопросам управления сложными научными комплексами и информационными системами. Всего в работе школы приняли участие студенты из 12 ведущих высших учебных заведений, в том числе из Санкт-Петербургского государственного университета, МГУ им. М. В. Ломоносова, ННГУ им. Н. И. Лобачевского, РЭУ им. Г. В. Плехана

нова, ТвГУ, НИЯУ «МИФИ», МГТУ им. Н.Э.Баумана, а также студенты из Словакии и Грузии. Для участников школы прочитаны лекции по базам данных, облачным вычислениям, электронным библиотекам, грид-технологиям, разработке программного обеспечения, ускорительному комплексу NICA, созданию центра Tier1 в ОИЯИ. Организаторами школы проведено соревнование среди

участников. В первый день занятий студентам было выдано задание, которое они могли решать и реализовывать в течение всей недели. Лучшее всех справился с заданием Кирилл Корепанов из МГТУ им. Н.Э.Баумана, второе место заняла команда студентов из ТвГУ и третье — из университета «Дубна». По окончании школы победителям были вручены призы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Maeno T. (Brookhaven Nat. Lab.) et al. (ATLAS Col-lab.) // J. Phys. Conf. Ser. 2014. V.513. P.032062; <https://inspirehep.net/record/1302031>.*
2. *Кореньков В. В. и др. // Компьютерные исследования и моделирование. 2014. №5. С. 635–642.*
3. *Кореньков В. В., Муравьев А. Н., Нечаевский А. В. // Электронный журнал «Системный анализ в науке и образовании». 2014. Вып. №2.*
4. *Заикина Т. Н. и др. // Тр. XVI Всерос. конф. RCDL-2014, Дубна, 2014. С. 349.*
5. *Аблязимов Т. О. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2014. Т. 11, №4. С. 828–846.*
6. *Ужинский В., Галоян А. arXiv:1410.6612 [hep-ph]. 2014.*
7. *Gusev A. A. et al. // Comput. Phys. Commun. 2014. V. 185. P. 2636–2654.*
8. *Lukyanov V. K. et al. // Bull. of the Rus. Acad. of Sci. Physics. 2014. V. 78, Iss. 5. P. 421–426.*
9. *Волохова А. В. и др. // Компьютерные исследования и моделирование. 2014. Т. 6, №2. С. 253–261.*
10. *Oprea A., Adam S., Adam Gh. // Romanian J. of Phys. 2014. No.5–6. P. 544–549.*
11. *Дикусар Н. Д. // Математическое моделирование. 2014. Т. 26, №3. С. 31–48.*
12. *Gerdt V., Khvedelidze A., Palii Yu. // J. Math. Sci. 2014. V. 200, No. 6. P. 682–689.*
13. *Grilli F. et al. // Physica C: Superconductivity. 2014. V. 504. P. 167–171.*
14. *Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Phys. Rev. A. 2014. V. 90. P. 013627-7.*
15. *Yukalov V. I., Yukalova E. P. // J. Phys. B. 2014. V. 47. P. 095302-6.*
16. *Земляная Е. В., Алексеева Н. В., Атанасова П. Х. // Вестн. РУДН. Сер. Математика. Информатика. Физика. 2014. №2. С. 363.*
17. *Айрян А., Прибыш Я. // Вестн. РУДН. Сер. Математика. Информатика. Физика. 2014. №2. С. 67–71.*
18. *Streltsova O. I. et al. // Phys. Rev. A. 2014. V. 89. P. 061602(R).*