

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ им. М. Г. МЕЩЕРЯКОВА

Мемориальный кабинет М. Г. Мещерякова



Деятельность Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова в 2022 г. была сосредоточена на обеспечении надежного функционирования и развитии сетевой и информационно-вычислительной инфраструктуры, а также развитии математического и программного обеспечения научно-производственной деятельности Института и научных центров государств-членов ОИЯИ на базе Многофункционального информационно-вычислительного комплекса (МИВК) ОИЯИ. Исследования проводились по двум темам: «Информационно-вычислительная инфраструктура ОИЯИ» и «Методы, алгоритмы и программное обеспечение для моделирования физических систем, математической обра-

ботки и анализа экспериментальных данных». Отличительной особенностью направлений проводимых исследований является тесное сотрудничество со всеми лабораториями Института, институтами государств-членов ОИЯИ и других стран.

Состоялся очередной этап модернизации суперкомпьютера «Говорун». Производительность этой высокопроизводительной системы выросла на 23,5 % и достигла уровня 1,1 Пфлопс.

В 2022 г. сотрудниками Лаборатории информационных технологий им. М. Г. Мещерякова опубликовано свыше 250 научных работ, 5 монографий, представлено более 100 докладов на международных и российских конференциях.

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ОИЯИ

Многофункциональный информационно-вычислительный комплекс, как крупный стратегический инфраструктурный проект ОИЯИ, успешно продолжил свое функционирование в 2022 г. и обеспечил решающую роль в исследованиях,

требующих современных вычислительных мощностей и систем хранения данных. Использование в архитектуре МИВК надежной инженерной инфраструктуры и современных информационных технологий: сетей с пропускной способ-

ностью до 4×100 Гбит/с, распределенных вычислений и систем хранения данных на основе грид-технологий и облачных вычислений, гиперконвергентного суперкомпьютера «Говорун» — позволяет говорить об уникальности проекта. Многофункциональность, доступность для расчетов в режиме 24×7 , масштабируемость и высокая производительность, надежная система хранения данных, информационная безопасность и развитая программная среда — основные требования, которым удовлетворяет МИВК.

Продолжилось активное использование ресурсов МИВК для научно-исследовательских и прикладных задач ОИЯИ. Благодаря использованию грид-технологий (DIRAC Interware), объединивших выделенные вычислительные ресурсы всех компонентов МИВК, успешно проходили сеансы моделирования для эксперимента MPD комплекса NICA. Грид-сайт Tier-1 для эксперимента CMS на LHC продолжил занимать лидирующее место среди аналогичных мировых сайтов. Tier-2/ЦИВК обеспечивал обработку данных всех экспериментов на LHC, NICA, FAIR и других крупномасштабных экспериментов, а также поддержку пользователей из лабораторий ОИЯИ и стран-участниц. Облачная среда ОИЯИ и стран-участниц использовалась главным образом для вычислений по Нейтринной программе ОИЯИ. Платформа HybriLiT, в состав которой входит основной ресурс для высокопроизводительных вычислений — суперкомпьютер «Говорун» и учебно-тестовый полигон, активно использовалась зарегистрированными пользователями.

Сетевая инфраструктура ОИЯИ

Сетевая инфраструктура ОИЯИ является важнейшим компонентом ИТ-инфраструктуры ОИЯИ и МИВК. Это сложный комплекс многофункционального сетевого оборудования и специализированного программного обеспечения (ПО). Она является фундаментом для созданной и продолжающей постоянно развиваться информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ, обеспечивая доступ в Интернет, к вычислительным ресурсам, системам хранения данных как внутри ОИЯИ, так и во внешних научных организациях, сотрудничающих с ОИЯИ. Сетевая инфраструктура ОИЯИ состоит из следующих функциональных частей: внешнего оптического телекоммуникационного канала передачи данных ОИЯИ–Москва, опорной магистрали локальной компьютерной сети ОИЯИ, локальных компьютерных сетей подразделений Института.

В 2022 г. надежно функционировали телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ: резервированный канал до Москвы с пропускной способностью 4×100 Гбит/с, прямой канал связи ОИЯИ–ЦЕРН с пропускной способностью 100 Гбит/с и резервный канал 100 Гбит/с, проходящий через Москву и Амстердам, обеспечивающие функционирование сети LHCOPN для связи

центров Tier-0 (ЦЕРН) и Tier-1 (ОИЯИ) и внешней наложенной сети LHCONe, предназначенной для центра Tier-2 ОИЯИ, для связи с использованием технологии RU-VRF в сотрудничестве с RUHEP, сетями Национальной исследовательской компьютерной сети России и RetN [1]. Для передачи данных по внешнему оптическому телекоммуникационному каналу используется технология DWDM (Dense Wave Division Multiplexing).

Распределение входящего и исходящего трафика по подразделениям ОИЯИ в 2022 г. (превышающего по входящему трафику 25 ТБ) приведено в таблице. Значительно увеличился трафик гостинично-ресторанного комплекса (ГРК), что связано с вводом в строй после ремонта корпуса на Московской, 2, который был оснащен сетевой инфраструктурой и выделением 512 IP-адресов.

Подразделение	Входящий трафик, ТБ	Исходящий трафик, ТБ
ЛФВЭ	430,2	209,23
ГРК	413,24	60,25
ЛИТ	330,76	204,99
ЛЯП	229,59	113,38
Университет «Дубна»	139,03	39,38
ЛЯР	137,7	32,69
ЛНФ	137,05	42,05
Управление	96,16	53
Узел удаленного доступа	84,88	11,84
УНЦ	52,97	11,51
ЛТФ	35,57	15,96
ЛРБ	29,49	4,53
УСИ	27,63	2,94

Общий входящий трафик ОИЯИ, включая сервера общего назначения, Tier-1, Tier-2, СК «Говорун» и облачные вычисления, составил в 2022 г. 29,56 ПБ, общий исходящий — 34,19 ПБ. Трафик с научно-образовательными сетями является основным и составляет 94,5 % от общего.

Локальная вычислительная сеть (ЛВС) базируется на магистральной опорной сети ОИЯИ с пропускной способностью 2×100 Гбит/с и распределенной многоузловой кластерной сетью между площадками ЛЯП и ЛФВЭ (4×100 Гбит/с).

В 2022 г. продолжалась модернизация центрального сетевого виртуального кластера сетевой службы ОИЯИ (NOC — Network Operation Center), который построен на базе открытого ПО Proxmox VE под лицензией GNU. Кластер NOC обеспечивает работу служб NOC и ОИЯИ, таких как dns, dhcp, proxy, mail, webmail, maillist, ssl, сервера БД, виртуальный хостинг, мониторинг nmis, sshgate, централизованный сбор логов, телефония sip и др.

Сетевая служба регулярно обновляет ПО на 15–20 серверах (webmail.jinr.ru, indico.jinr.ru, mail.jinr.ru, maillist.jinr.ru, mx1.jinr.ru, mx2.jinr.ru, auth-1.jinr.ru (login.jinr.ru), auth-2.jinr.ru и т. д.), что позволяет системам быть в актуальном состоянии.

В 2022 г. зарегистрирована зона jinr.int, почтовый сервер mail.jinr.ru адаптирован для работы с зоной jinr.int.

Планомерно осуществлялись работы по усовершенствованию почтового сервиса mail.jinr.ru: подготовлен и введен в эксплуатацию новый гипервизор, разработаны скрипты, создан новый сервер adm-mail.jinr.ru для «холодной» копии mail.jinr.ru. Осуществлялась поддержка сервисов почтовых рассылок (maillist.jinr.ru), «личный кабинет», News, VPN, eduroam, Elibs, IPDB.

За год отработано около 1300 пользовательских заявок. С марта обеспечивается усиленный режим защиты сети. Выявлено и отработано более 80 инцидентов, связанных со взломами ресурсов сети ОИЯИ, нарушениями авторских прав и т. д. В рамках сотрудничества со сторонними научными организациями обеспечен VPN доступ в сеть более чем для 110 пользователей вычислительных ресурсов. Обеспечена система мониторинга и отслеживания состояния более чем 770 элементов сети. Введен в эксплуатацию сервис удаленного доступа sshgate. Для веб-сайтов, открываемых на доступ извне, выполняется обязательная проверка на уязвимости.

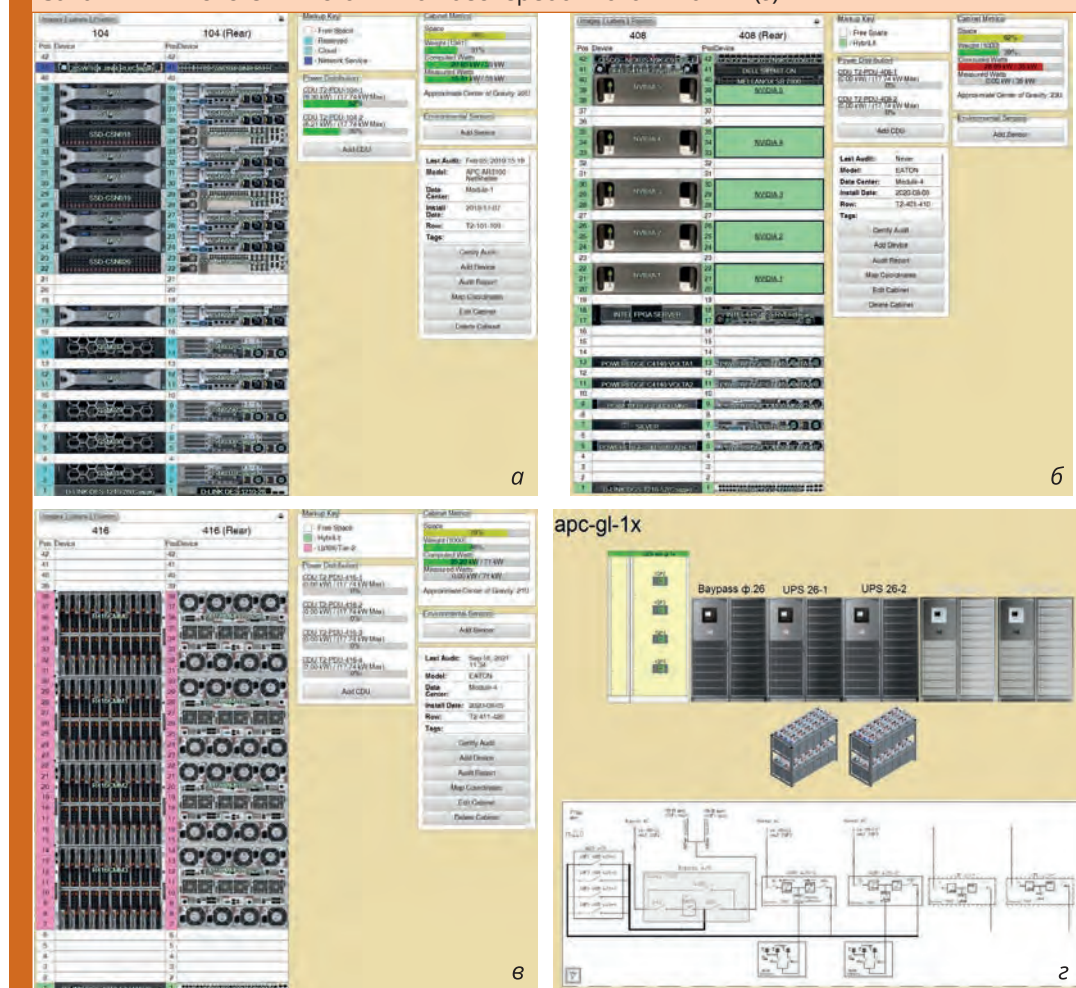
ЛВС ОИЯИ содержит 9291 сетевой элемент и 18044 IP-адреса, 6355 пользователей, 4477 адресов электронной почты @jinr.ru, 1455 пользователей электронных библиотек, 837 пользователей сервиса удаленного доступа и 111 пользователей сервиса EDUROAM.

Инженерная инфраструктура МИВК

В 2022 г. продолжены работы по замене и усовершенствованию инженерной инфраструктуры МИВК, предназначенной для обеспечения надежной, бесперебойной и отказоустойчивой работы информационно-вычислительных систем и ресурсов хранения данных.

Вычислительные мощности МИВК размещены в одном вычислительном зале площадью 800 м² на 2-м этаже корпуса ЛИТ. В настоящее время он состоит из восьми отдельных модулей с вычислительным оборудованием общей допустимой мощностью 2 МВт. Все стойки обеспечены питанием от источников бесперебойного питания с автономностью 10–15 мин. Стойки оснащены интеллектуальными (переключаемыми и дозируемыми) устройствами распределения электроэнергии, которые позволяют осуществ-

Рис. 1. Примеры системы визуализации оборудования в стойках 104 (а), 408 (б) и 416 (в) зала МИВК и системы источников бесперебойного питания (г)



влять детальный мониторинг потребления электроэнергии. В эксплуатации находятся два резервных дизельных генератора для обеспечения вычислительного центра электроэнергией в случае отключения от внешних электросетей. Все модули, кроме СК «Говорун», имеют воздушное охлаждение. Суперкомпьютер «Говорун» полностью охлаждается «горячей» водой, что обеспечивает плотность мощности 100 кВт на стойку и PUE = 1,06.

Все технологическое оборудование, обеспечивающее как гарантированное энергоснабжение МИВК, так и системы охлаждения, расположено на первом и цокольном этажах здания. Чиллеры, сухие градирни и дизель-генераторы расположены на прилегающей к зданию ЛИТ территории.

Для контроля и учета оборудования МИВК эксплуатируется система DCIM (Data Center Infrastructure Management). Это программное обеспечение позволяет визуализировать и управлять физической инфраструктурой МИВК на основе данных об оборудовании и его расположении, занесенных в базу данных DCIM, предоставлять сервисы управления и мониторинга. На рис. 1 приведены примеры визуализации оборудования.

Грид-среда ОИЯИ (сайты Tier-1 и Tier-2)

В 2022 г. продолжалось успешное функционирование грид-сайтов ОИЯИ, была обеспечена их практически 100 %-я надежность и доступность.

На протяжении многих лет ресурсный центр первого уровня Tier-1 использовался только для выполнения заданий по эксперименту CMS на LHC в рамках участия ОИЯИ и стран-участниц в этом эксперименте. С 2021 г. внедрение платформы DIRAC позволило использовать выделенные ресурсы этого центра для задач моделирования эксперимента MPD проекта NICA. Количество выделенных ресурсов регулируется запросами от коллаборации MPD. В настоящее время Tier-1 содержит 18656 ядер с общей производительностью 297 135,18 HEP-SPEC06. Используемое ПО и компиляторы: CentOS Scientific Linux версии 7.9, gcc (GCC) 4.8.5, gcc-11.2.1, gcc-c++-11.2.1, gcc-gfortran-11.2.1, C++ (g++ (GCC)) 4.8.5, GNU Fortran (GCC) 4.8.5, DCACHE-6.2 для хранения данных, Enstore 6.3 для ленточных библиотек и FTS. Общая полезная емкость дисковых серверов — 14 ПБ, ленточных библиотек — 50,6 ПБ. Система долговременного хранения данных на библиотеке IBM TS4500 ориентирована на обслуживание экспериментов комплекса NICA и CMS. ПО для

Рис. 2. Вклад мировых центров Tier-1 в обработку экспериментальных данных CMS за 2022 г.: а) распределение по нормированному времени ЦПУ в HEP-SPEC06 часах; б) количество обработанных событий; в) статистика использования центра Tier-1 ОИЯИ коллаборацией CMS по разным типам потоковой обработки данных. г) Распределение по числу задач, выполненных на Tier-1 коллаборациями CMS, BM@N, MPD и SPD в 2022 г.

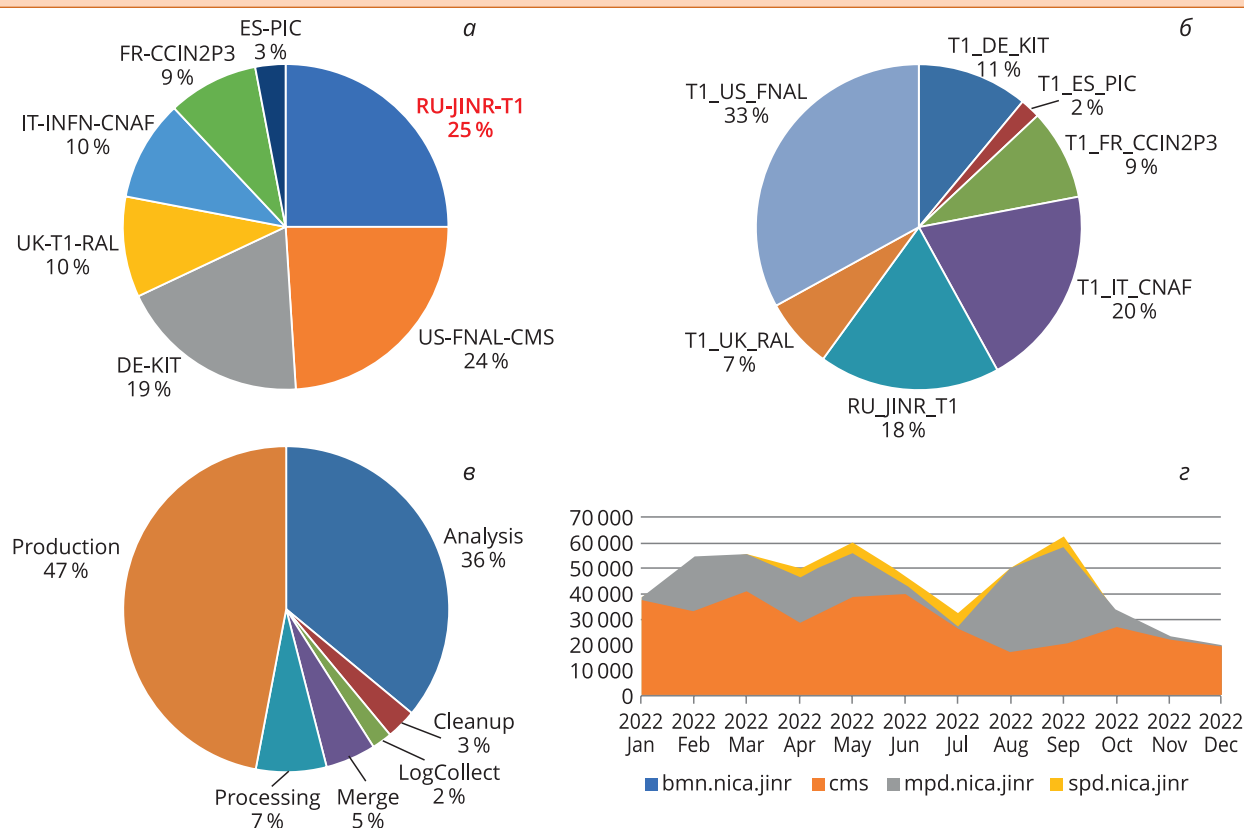
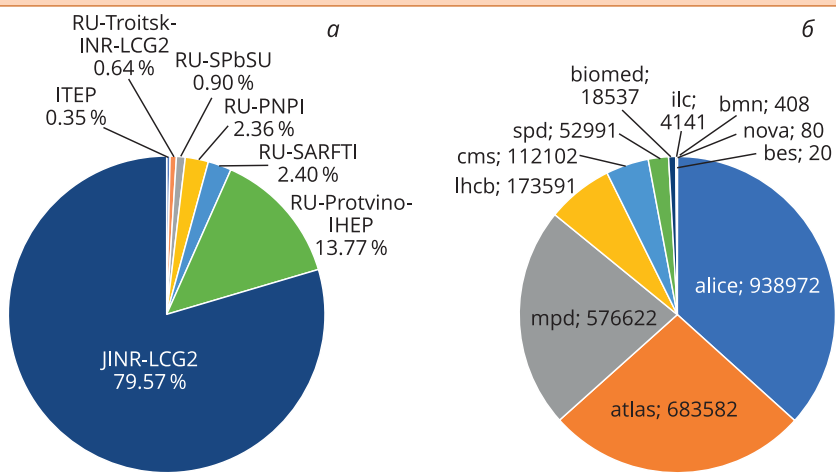


Рис. 3. а) Распределение выполненных на грид-сайтах RDIG задач; б) использование сайта Tier-2 ОИЯИ (JINR-LCG2) виртуальными организациями в рамках грид-проектов



NICA устанавливается в CVMFS с помощью GitLab самими пользователями/разработчиками ПО.

По производительности Tier-1 (RU_JINR_T1) занимает первое место среди других центров Tier-1 для эксперимента CMS в мире (рис. 2, а). В 2022 г. обработано более 275 миллионов событий, что составляет 18 % от общего числа обработанных событий (рис. 2, б) и 25 % от общей загрузки ЦПУ всех центров Tier-1 для эксперимента CMS.

На рис. 2, в приведена статистика использования Tier-1 ОИЯИ в эксперименте CMS по разным типам потоковой обработки данных (реконструкция, моделирование, повторная обработка, анализ и т. д.). На рис. 2, г представлено распределение по числу задач, выполненных на Tier-1

делением выполненных на грид-сайтах RDIG задач. На рис. 3, б приведены данные по использованию сайта ОИЯИ Tier-2 (JINR-LCG2) виртуальными организациями в рамках грид-проектов в 2022 г.

В 2022 г. продолжилось использование пользователями подразделений ОИЯИ системы хранения данных на базе ПО EOS емкостью 17 ПБ. На рис. 4 представлена статистика использования системы EOS.

Облачная инфраструктура

На рис. 5 приведена информация о потреблении ресурсов облачной инфраструктуры в 2022 г.: основными пользователями являются коллаборации нейтринных экспериментов и ЛИТ.

Рис. 4. Статистика использования системы EOS группами пользователей и коллаборациями

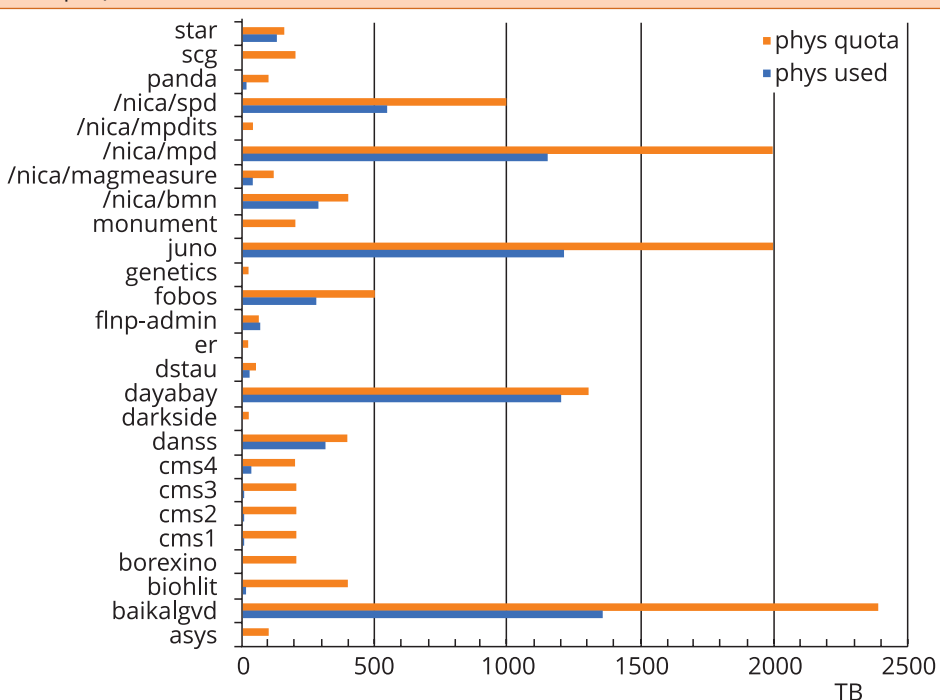
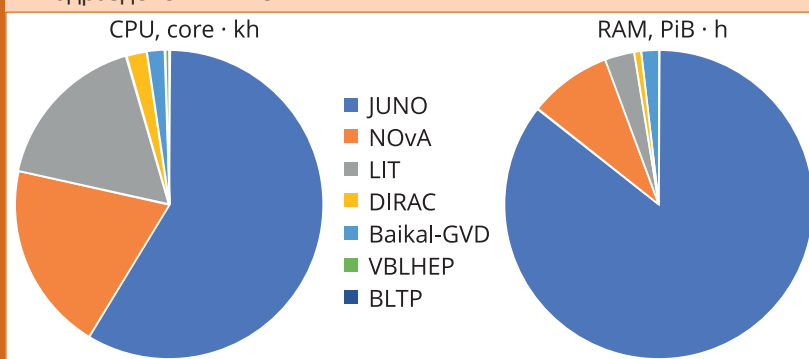


Рис. 5. Использование облачных вычислений коллаборациями и подразделениями ОИЯИ



В 2022 г. продолжились работы в рамках развития и поддержки вычислительной платформы для нейтринных экспериментов. В связи с прекращением поддержки GSI-аутентификации и переходом экспериментов DUNE и NOvA на систему аутентификации с использованием токенов, кластер HTCondor облачной нейтринной платформы был обновлен до версии 9.0, в которой была реализована поддержка аутентификации по JSON web-токенам (так называемым JWT). Для эксперимента DUNE было развернуто и подключено к Open Science Data Federation (OSDF) кэширующее хранилище данных StashCache общим объемом 1 ТБ. По запросу коллаборации JUNO разработан экспортер данных как о текущей нагрузке в батч-кластере нейтринной платформы для использования этих данных коллаборацией с целью оптимизации распределения вычислительных задач в глобальной грид-инфраструктуре JUNO, так и об используемом хранилище EOS и загрузке сетевых каналов ОИЯИ.

В сервисе интерактивных вычислений jupyter.jinr.ru, по запросу пользователей, вместо набора разных образов с различным ПО для анализа данных был подготовлен один универсальный образ на базе DataScience Notebook из набора Jupyter Docker Stacks, включающий все базовое ПО и модифицированное окружение, необходимое для корректной работы ПО ROOT.

Введен в эксплуатацию сервер с графической картой NVIDIA A100 Ampere 40 GB для пользователей нейтринной вычислительной платформы, занимающихся разработкой алгоритмов машин-

ного обучения, а также использующих соответствующее прикладное ПО.

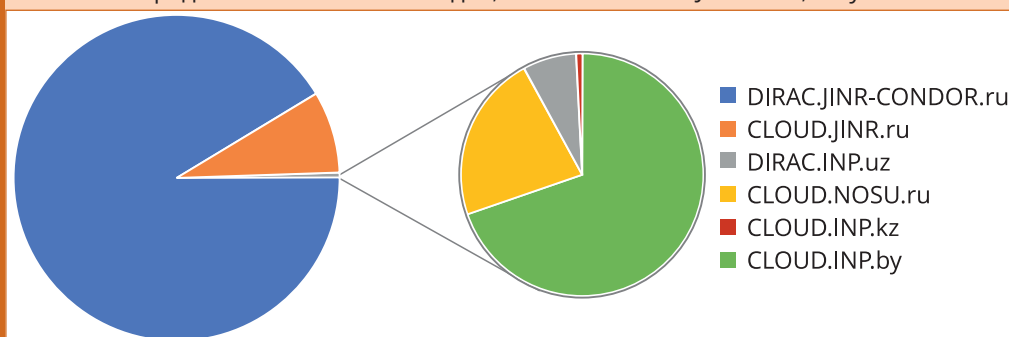
В облачном хранилище ОИЯИ создана дополнительная локальная реплика наборов смоделированных и реальных данных в ближнем и дальнем детекторах эксперимента NOvA для проведения осцилляционного анализа экспериментальных данных полностью независимо от инфраструктурных инструментов FermiLab.

Произведено копирование порядка 60 ТБ данных эксперимента Borexino из дата-центра CNAF (Италия) на EOS-хранилище в ОИЯИ. Для аутентификации и авторизации пользователя, под которым копировались данные, использовался достаточно новый подход — с помощью сервиса IAM (Identity & Access Management).

Запущен в эксплуатацию веб-портал <http://dice.jinr.ru> с информацией об участниках распределенной информационно-вычислительной среды (JINR Distributed Information and Computing Environment — JINR DICE), объединяющей облако ОИЯИ и облачные инфраструктуры стран-участниц ОИЯИ, и о проведенных обучающих мероприятиях по работе в JINR DICE. Больше всего задач в среде JINR DICE в 2022 г. было выполнено на нейтринной вычислительной платформе (рис. 6, DIRAC.JINR-CONDOR.ru). Основным потребителем ресурсов JINR DICE в 2022 г. являлась коллаборация Baikal-GVD (96 %).

Кроме того, на базе облака ОИЯИ развернут ряд вспомогательных облачных сервисов для различных научных экспериментов ОИЯИ: несколько систем хранения документации для экспериментов и групп пользователей (ad-docs.jinr.ru для ускорительного отделения ЛФВЭ, spd-docs.jinr.ru и bmn-docs.jinr.ru для экспериментов SPD и BM@N соответственно, baikal-docs.jinr.ru для эксперимента Baikal-GVD, а также neutrino-docdb.jinr.ru для совместного использования участниками Нейтринной программы ОИЯИ); для ускорительного отделения ЛФВЭ реализована и внедрена первая версия системы ведения электронных журналов ad-operations.jinr.ru.

Рис. 6. Распределение количества задач, выполненных в JINR DICE, по участникам



Гетерогенная инфраструктура

Проведение ресурсоемких массивно-параллельных расчетов и работа с большими данными обеспечивается гетерогенной инфраструктурой МИВК ОИЯИ, представленной платформой HybriLIT. В состав платформы входят: учебно-тестовый полигон, экосистема ML/DL/HPC [2] и суперкомпьютер «Говорун», объединенные единой программно-информационной средой. СК «Говорун» является основной вычислительной частью платформы HybriLIT и обладает инновационной гиперконвергентной программно-определяемой архитектурой с уникальными свойствами по гибкости настройки под задачу пользователя. В состав СК «Говорун» входят GPU- и CPU-компоненты, а также иерархическая система обработки и хранения данных.

В ноябре 2022 г. был осуществлен очередной этап модернизации СК «Говорун», связанный с расширением CPU-компонента, реализованный в рамках гиперконвергентного подхода к построению вычислительного комплекса, положенного в основу СК «Говорун». В результате модернизации CPU-компонент был расширен на 32 гиперконвергентных вычислительных узла. Каждый узел содержит два процессора Intel Xeon Platinum 8368Q (частота 2,6 ГГц, 38 ядер, кэш 57 Мбайт, тепловыделение 270 Вт), 8 модулей оперативной памяти DDR4 — 256 ГБ, 8 модулей энергонезависимой памяти Intel Optane DC Persistent Memory — 2 ТБ, 4 твердотельных SSD диска в форм-факторе EDSFF E1.S (рулер) с интерфейсом NVMe общей емкостью 16 ТБ, а также твердотельный диск SSD NVMe в формате M.2 емкостью 128 ГБ. Кроме того, каждый узел снабжен двумя адаптерами Intel Omni-Path с пропускной способностью 100 Гбит/с (см. рис. 7).

В результате модернизации CPU-компонента производительность СК «Говорун» возросла на 239 ТФлопс, а объем иерархической системы обработки и хранения данных СК «Говорун» вырос для слоя «очень горячих данных» DAOS на 1,6 ПБ и для слоя «теплых данных» на 8 ПБ. В итоге, производительность СК «Говорун» выросла на 23,5 % и достигла уровня 1,1 ПФлопс, а общая емкость иерархического хранилища выросла до 8,6 ПБ.

Гиперконвергентность новых вычислительных узлов уже позволила задействовать их для задач массовой генерации и реконструкции данных эксперимента MPD NICA. Следует отметить, что для ряда задач MPD возникла потребность в большом объеме оперативной памяти, которому удовлетворяют новые узлы. Вычислительные ресурсы и иерархическая система обработки и хранения данных СК «Говорун» были интегрированы на базе платформы DIRAC в распределенную гетерогенную среду, включающую в себя ресурсы ОИЯИ и стран-участниц. Практика использования различных вычислительных ресурсов ОИЯИ и других институтов коллаборации MPD показала, что к настоящему времени наиболее эффективным является использование ресурсов именно СК «Говорун» (см. рис. 8).

На рис. 8, а представлена диаграмма использования различных компонентов МИВК в распределенной гетерогенной среде на базе платформы DIRAC для задач MPD. При этом доля тех задач, которые могут быть посчитаны только на СК «Говорун», составила в 2022 г. порядка 44 %, а полный вклад ресурсов СК «Говорун» в массовую генерацию и реконструкцию событий для эксперимента MPD составил порядка 56%. Рис. 8, б иллюстрирует увеличение доли вычислительных ресурсов МИВК в гетерогенной среде для задач MPD. Резкое увеличение доли СК «Говорун» свя-

Рис. 7. Расположение новых узлов СК «Говорун»

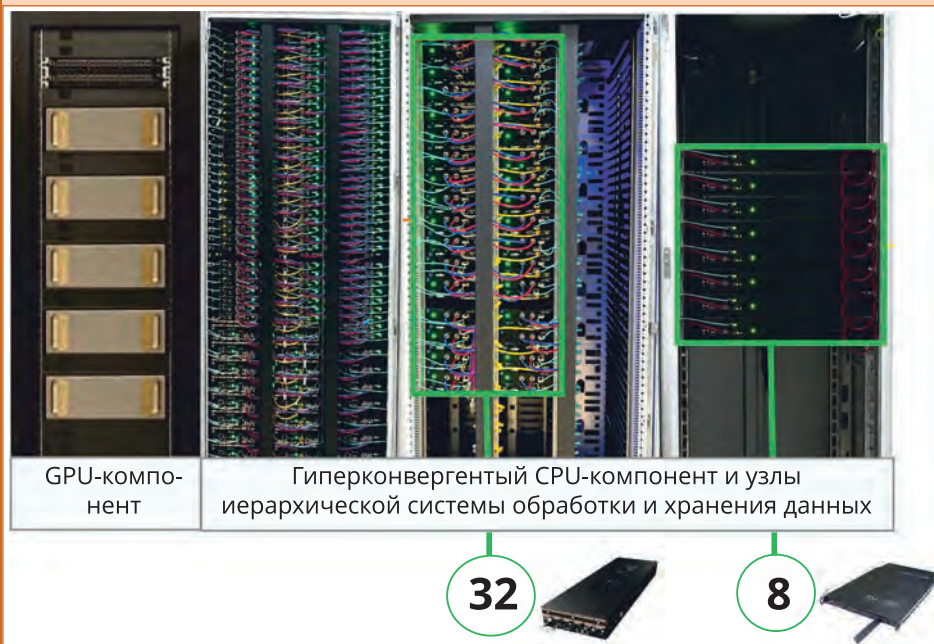
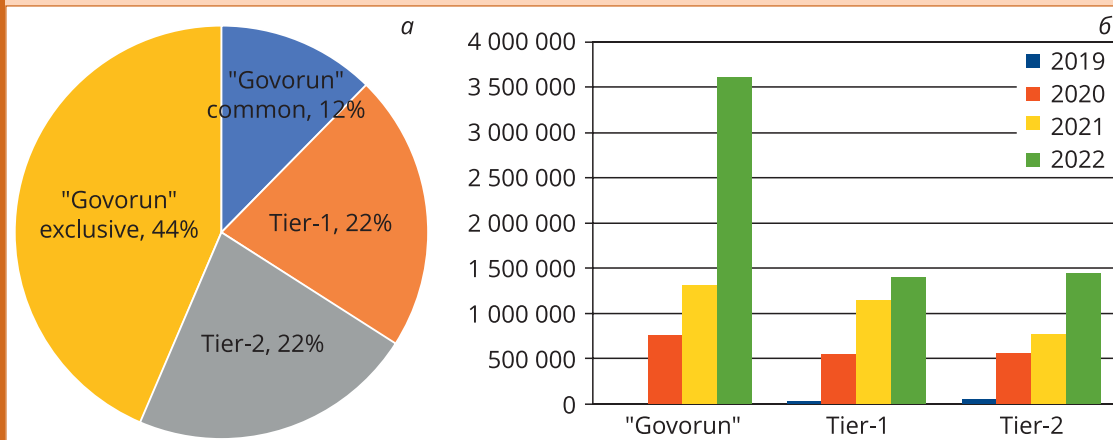


Рис. 8. Распределенная гетерогенная среда на базе платформы DIRAC для задач MPD: а) доля использования в 2022 г. различных компонентов МИВК; б) увеличение доли вычислительных ресурсов МИВК в нормализованных CPU NEP-SPEC06 днях



зано с проведенной в 2022 г. модернизацией, так, на новых узлах было сгенерировано более 50 млн событий.

Проведенная модернизация СК «Говорун» позволит ускорить исследования в области решеточной квантовой хромодинамики, качественно повысить эффективность моделирования динамики столкновений релятивистских тяжелых ионов, провести расчеты радиационной безопасности экспериментальных установок ОИЯИ и повысить эффективность решения прикладных задач. Обновленный СК «Говорун» даст возможность не только проводить расчеты, но и использовать суперкомпьютер как научно-ис-

следовательский полигон для выработки программно-аппаратных и ИТ-решений для задач, решаемых в ОИЯИ.

Общее число пользователей СК «Говорун» к настоящему времени составляет 323 человека, из них 242 являются сотрудниками ОИЯИ, 81 — из стран-участниц.

В течение 2022 г. всеми группами пользователей ресурсов СК «Говорун» было выполнено 555 079 задач, что соответствует 40 миллионам ядро-часов, а на GPU-компоненте — 455 задач, что соответствует 32 890 GPU-часам. Средняя загрузка CPU-компонента составила 96,2 %, а загрузка GPU — 91,4 %.

Сотрудник ЗАО «РСК Технологии» Ю. Н. Мигаль рассказывает о текущем этапе модернизации суперкомпьютера «Говорун»



Система мониторинга

В рамках развития системы мониторинга ресурсами грид-сайтов Tier-1 и Tier-2 в ОИЯИ была создана новая система аккаунтинга [3], которая позволила значительно расширить функционал оригинальной системы, а также сократить время получения статистических данных за счет создания автоматической обработки данных системой визуализации. Реализованный подход обеспечивает отображение статистических данных напрямую из SLURM (Simple Linux Utility for Resource Management) и позволяет осуществлять учет ресурсов и их использование как в рамках распределенной системы обработки данных, так и локально. Система визуализации предоставила мощный инструмент для анализа и составления различных отчетов, докладов и презентаций. Система аккаунтинга интегрирована в общую систему мониторинга МИВК LITMon, что позволило организовать единую точку входа и объединить разрозненные аккаунтинги в единую структуру.

Информационные сервисы

В 2022 г. выполнен ряд работ по развитию и текущему сопровождению системы электронного документооборота (СЭД) «Дубна». Для дальнейшего развития и оптимизации электронного документооборота программное обеспечение СЭД было настроено для процесса согласования технических заданий и заданий на проектирование для разработки проектной и/или рабочей документации по всем объектам капитальных вложений Института, для документооборота счетов и актов выполненных работ по статьям бюджета 18 («Проектные работы») и 19 («Сооружение зданий и технологических систем»), для документооборота счетов и актов выполненных работ КС-2, КС-3 по статье бюджета 14 пп. а, б и т. д. Выполнен ряд работ по адаптации СЭД «Дубна» к изменениям в организации закупочных процедур в ОИЯИ.

Осуществлялось текущее сопровождение и развитие по запросам пользователей информационных систем APT EVM для NICA, CERND, B

ISNA, HR LHEP, ADB2, PIN, ИСС, «База документов», INDICO, «Электронный фотоархив».

Продолжено сопровождение ряда сайтов Управления ОИЯИ, программ учета международного научно-технического сотрудничества (МНТС) и т. п. По ряду программ получены свидетельства о регистрации программы для ЭВМ.

В 2022 г. начаты работы по созданию платформы Digital JINR, основной целью которой является предоставление единой среды для создания и развития цифровых сервисов, их интеграции между собой, анализа информации о всех аспектах деятельности ОИЯИ. В цифровую экосистему будет входить широкий спектр сервисов — от ресурсов для пользователей базовых установок до оформления командировок, путевок, заказа справок и т. д. Основные группы сервисов — административные (зона ответственности Департамента развития цифровых сервисов (ДРЦС) ОИЯИ) и научные. В настоящее время реализован прототип единой точки доступа Digital Eco System (<https://eco.jinr.ru>), а также ряд сетевых сервисов, телефонный справочник и некоторые другие. Доступ к системе реализован на базе службы аутентификации JINR Single Sign-On (SSO).

Продолжены работы по сопровождению и модернизации центральных информационных серверов, порталов и баз данных для информационного и программного обеспечения деятельности ЛИТ (lit.jinr.ru) и ОИЯИ (wwwinfo.jinr.ru, dissertations.jinr.ru, pepan.jinr.ru и др.).

В опытную эксплуатацию введена информационно-аналитическая система сопровождения лицензий (LMS, soft-lit.jinr.ru). Основной целью создания LMS является автоматизация управления лицензионных программных продуктов. LMS состоит из системы сетевого лицензирования (NLS), баз данных и веб-интерфейса. NLS, как один из основных компонентов, реализует автоматическое предоставление и выпуск сетевых лицензий. Веб-интерфейс LMS реализован в среде разработки «СЭД Дубна» с использованием веб-приложения LegoToolkit.

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

Обеспечение математической, алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ, является одним из основных направлений деятельности ЛИТ. Ниже приведена краткая информация о некоторых из полученных результатов.

Для оптимизации характеристик магнитной системы эксперимента CBM (FAIR) проведено

трехмерное моделирование защитного экрана фотодетекторов RICH [4]. Для магнитной системы BM@N проанализировано распределение поля в рабочей области магнита.

Проведено численное моделирование гладко-нерегулярных жидкокристаллических волноводных структур (4-суано-40-пентилбипhenyl или 5cb) под действием внешнего поля [5], что позволило изучить возникающие при этом неоднород-

ные нестационарные области. Показано, что при включении внешнего импульсно-периодического электрического поля затухание и размеры неоднородностей уменьшаются.

Предложено использовать при численных расчетах вольт-амперных характеристик длинных джозефсоновских переходов вместо схемы Рунге-Кутты «явную» схему второго порядка точности [6]. Разработан численно-аналитический алгоритм оценки ошибок округления. Установлена их ограниченность на всем интервале вычисления при применении предлагаемой схемы. Расчеты проводились на СК «Говорун» с использованием системы REDUCE.

Проведен анализ данных пион-ядерного рассеяния для ряда ядер-мишеней на основе микроскопической модели пион-ядерного потенциала [7]. Полученные численные результаты по сечению упругого рассеяния $\pi^\pm + {}^{40}\text{Ca}$ при энергиях 116, 163 и 241 МэВ подтверждают ранее сделанные выводы о влиянии ядерной среды на параметры амплитуды пион-нуклонного рассеяния.

С целью изучения ширины распада (времени жизни) элементарных частиц создан алгоритм вычисления многомерных интегралов столкновения, основанный на методе Монте-Карло [8]. Алгоритм применен для расчета ширины распада пиона в горячей среде, характерной для процессов столкновения тяжелых ядер. Расчеты производились на гетерогенном кластере HybriLIT. Для оптимизации времени расчетов использованы параллельные вычисления на основе технологий OpenMP и CUDA.

Реализована автоматизация сборки, настройки и установки программного обеспечения (DevOps) для разработки и использования MPDRoot [9]. Типичные операции MPDRoot DevOps, которые ранее были громоздкими и трудоемкими, сокращены до выполнения нескольких команд, сопровождаемых кратким руководством по развертыванию, что значительно снижает вероятность ошибок на стороне конечного пользователя и разработчика. Основным преимуществом текущей реализации является ее широкая совместимость и полная модульность, упрощающая обслуживание, обновление и выявление источника потенциальных проблем в будущем.

Проведена модернизация и последующая оптимизация программных моделей трековых детекторов эксперимента BM@N для актуальной конфигурации экспериментальной установки (осенний сеанс 2022 г.) [10]. Произведен расчет карты электростатического поля для актуальной конфигурации детектора GEM с целью повышения качества детального моделирования процессов внутри трехкаскадных газовых электронных умножителей.

Выполнена настройка алгоритмов реконструкции данных для конфигурации SRC на установке BM@N во время весеннего сеанса 2022 г.

Развиты алгоритмы на основе глубоких нейронных сетей для реконструкции событий на временном отрезке установки SPD в условиях высокой светимости. Усовершенствована рекуррентная нейронная сеть TrackNET, оптимизированная для работы на СК «Говорун» [11]. Достигнута производительность обработки данных до 2000 событий в секунду с эффективностью до 97 % и долей ложных треков 5 %.

В рамках работ по созданию конфигурационной информационной системы [12] для экспериментов проекта NICA разработан менеджер конфигураций: библиотека C++ классов для работы с API DDS, обмена данных с базой данных и обработки REST запросов. Ведутся работы по передаче конфигурационной информационной системы в опытную эксплуатацию.

Начата разработка алгоритмов реконструкции треков и методов оценки параметров работы новых кассет-детекторов HGCal эксперимента CMS в тестовом модуле на космических мюонах [13]. Проведено детальное моделирование тестовой установки с определением оптимальных размеров триггера и чувствительных плоскостей для последующего тестирования новых детекторов.

Рассмотрено применение моделей HIJING, EPOS 1.99, UrQMD и Geant4 FTF для анализа экспериментальных данных коллаборации NA61/SHINE. Показано, что Geant4 FTF хорошо описывает данные о быстротных распределениях π -мезонов во взаимодействиях ${}^{40}\text{Ar} + {}^{45}\text{Sc}$ при $\sqrt{s_{NN}} = 5,2$ и 6,1 ГэВ [14].

На суперкомпьютере «Говорун» проведена серия вычислительных экспериментов с использованием целого ряда квантовых симуляторов, таких как QuEST, Qiskit, CuQuantum, и генератора квантовых схем Circ, способных работать на различных вычислительных архитектурах [15]. Показано, что размерность вектора состояния экспоненциально растет с увеличением числа кубитов, а возможности моделирования квантовых алгоритмов на СК «Говорун» (конфигурация до модификации) ограничены 38 кубитами на CPU, 31 кубитом на одном GPU и 34 кубитами на восьми GPU [16].

В 2022 г. библиотека JINRLIB (<http://www.info.jinr.ru/programs/jinrlib/>) пополнилась следующими программами, разработанными сотрудниками ЛИТ: INQSIM — программой преобразования полностью симметричных квадратурных правил типа PI на 2-, ..., 6-симплексах из компактного вида в развернутый; FITTER_WEB — программой для фитирования экспериментальных данных, полученных на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов, реализованной в виде Web-приложения.

Разработана и опубликована в библиотеке программ CPC программа KANTBP 3.1 для расчета значений энергии, матриц отражения и прохождения и соответствующих волновых функций в подходе адиабатических связанных каналов [17]. Теоретические сечения, полученные с помощью

программы KANTBP 3.1, хорошо описывают экспериментальные данные для различных реакций слияния и деления тяжелых ионов.

Исследованы импульсные распределения ядра и электронов в случае двукратной комптоновской ионизации атома гелия при энергии фотонов 40 кэВ [18]. Установлено, что импульсное распределение двухзарядного иона очень близко к комптоновскому профилю ядра в основном состоянии атома гелия, а импульсное распределение однозарядного иона совпадает с комптоновским профилем электрона. Теоретическое обоснование нового метода дано в [19].

Байесовская автоматическая адаптивная квадратура одномерных интегралов Римана с двумя правилами (B2AAQ) критически управляется априорной информацией, предоставленной пользователем. Определены условия, обеспечивающие прямой элементарный ввод параметров задачи, которые приводят либо к одному дереву, либо к лесу деревьев решений на подынтервалах. Это обеспечивает повышение устойчивости, надежности и эффективности B2AAQ, а также значительное расширение его области применения по сравнению с пакетом QUADPACK, который является ядром разделов вычислительной интеграции основных компьютерных библиотек по всему миру [20].

Проведено численное исследование быстрого регулирования направлением намагниченности в магнитных наноматериалах, таких как магнитные наномолекулы и нанокластеры [21]. Метод может найти применение при создании запоминающих устройств и других устройств спинтроники.

Для описания пандемии COVID-19 предложена математическая модель мультифрактальной динамики. Рассчитанные параметры модели точно определяют параметры тренда и большого скачка суточных заболеваний. Вычислены фрактальные размерности различных сегментов суточной заболеваемости в мире и вариации основного репродукционного числа COVID-19 [22].

Проанализирован Q_3 -индикатор классичности квантовых состояний с различными симметриями трехуровневой квантовой системы [23], определяемый как вероятность нахождения состояния с положительной функцией Вигнера в унитарно-инвариантном ансамбле случайных состояний, в метриках Гильберта-Шмидта, Буреша и Боголюбова-Кубо-Мори. В результате расчетов Q_3 -индикаторов во всех метриках была выявлена закономерность: состояния с «большей» симметрией являются более классическими.

НАУЧНО-ПРИКЛАДНЫЕ РАБОТЫ

Разработана программно-аппаратная платформа на основе встраиваемых в контур управления квантовых нечетких регуляторов для решения задачи управления давлением и расходом жидкого азота сверхпроводящих магнитов криогенной системы ускорительного комплекса NICA [24]. Квантовый регулятор показал наиболее высокое быстродействие в достижении целевого значения, низкое перерегулирование и точность достижения цели управления в срав-

нении с остальными типами регуляторов (синяя кривая, рис. 9). Проектирование квантовых нечетких регуляторов основано на квантовых информационных технологиях и осуществляется с помощью разработанного сотрудниками ЛИТ программного инструментария QSCIT (Quantum Soft Computational Intelligence Toolkit).

В рамках экосистемы ML/DL/HPC [2] на примере решения конкретной задачи по изучению динамики намагниченности в джозефсоновском φ_0 -переходе представлена методика разработки программных модулей на базе JupyterHub, позволяющих не только проводить расчеты, но и визуализировать результаты исследования и сопровождать их необходимыми формулами и пояснениями (рис. 10). Разработана параллельная реализация алгоритма для проведения расчетов при различных значениях параметров модели на основе Python-библиотеки Joblib, а также модули с интеграцией Matlab-кода в Jupyter Notebook, позволяющие эффективно проводить прикладные расчеты для анализа изображений.

Продолжено развитие информационной системы для задач радиационной биологии в рамках совместного проекта ЛИТ и ЛРБ на базе экосистемы ML/DL/HPC: разработан модуль для изучения поведенческих паттернов мелких лабораторных животных, подверженных радиационному воздействию. Модуль позволяет автоматизировать анализ видеоданных, получаемых при

Рис. 9. Управление процессом достижения заданного уровня давления азота разными типами регуляторов в режиме охлаждения (синяя кривая — квантовый регулятор, зеленая — нечеткий регулятор, красная — PID-регулятор)

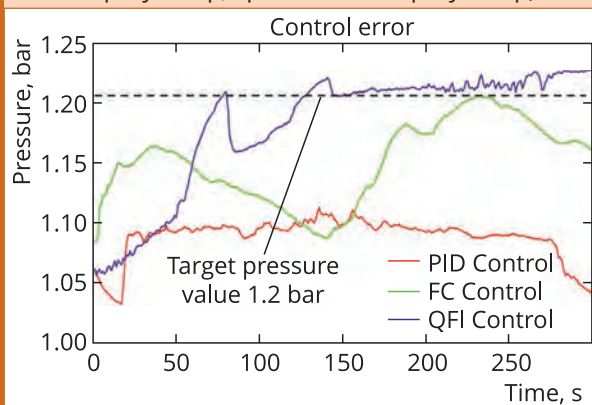
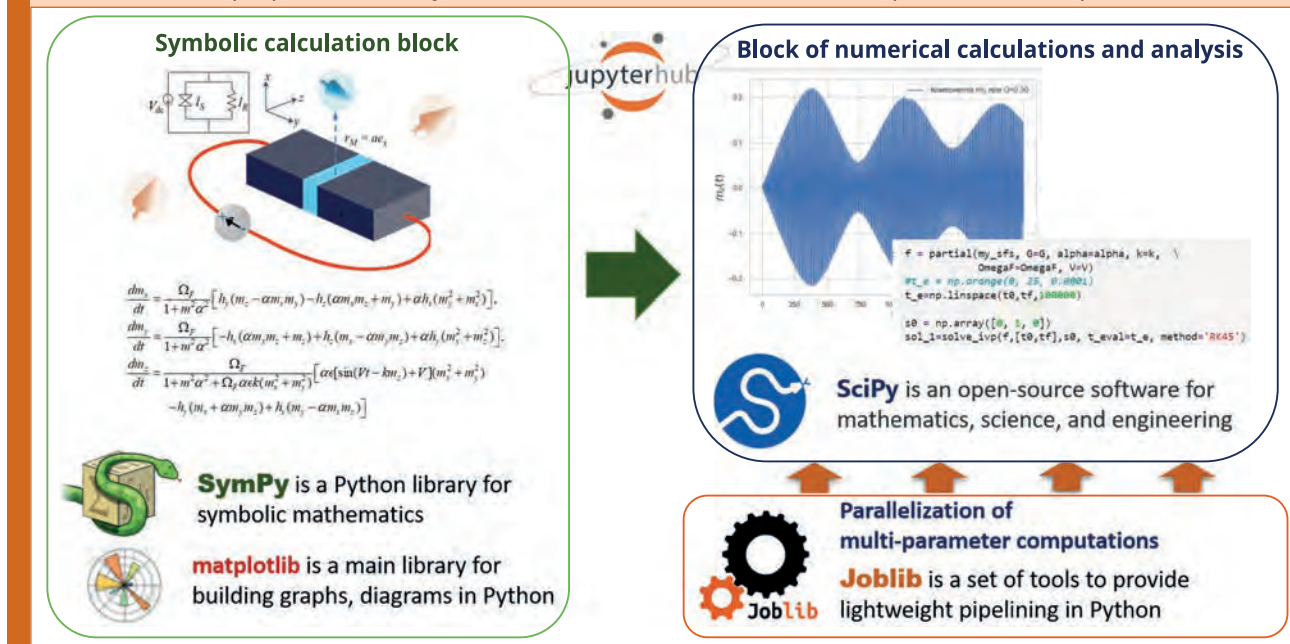


Рис. 10. Схема программных модулей для исследования систем с джозефсоновскими переходами



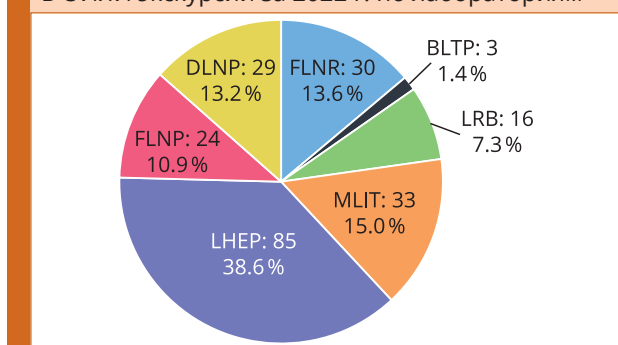
тестировании грызунов в различных тест-системах, одной из которой является «Открытое поле». Установка представляет собой круглую арену с расчерченными секторами и отверстиями. Предложен подход разметки арены на основе определения ключевых точек на базе нейросетевого подхода [25]. Рассмотрено три нейросетевых модели: простая сверточная модель и две модели на базе архитектур VGG16 и Xception, обученные с использованием методики переноса обучения. Рассмотренные нейросетевые архитектуры показали сравнимые результаты, однако лучшую точ-

ность обеспечил подход, основанный на простой сверточной модели. В дальнейшем предполагается расширение набора данных для обучения и расширение набора ключевых точек для повышения точности определения разметки.

Продолжены исследования, проводимые совместно с ЛНФ в рамках международной программы UNECE ICP Vegetation по мониторингу и прогнозированию процессов загрязнения воздуха в странах Европы и Азии. Исследована возможность использования данных дистанционного зондирования Земли совместно с методами машинного обучения для прогнозирования загрязнения воздуха тяжелыми металлами [26]. Средняя точность моделей превысила 89 %. Построены модели загрязнения алюминием, железом и сурьмой в Центральном регионе России.

Совместно с УНЦ разработан сервис планирования и учета экскурсий в ОИЯИ — <https://jinrex.jinr.ru>. Основные функции сервиса: информация обо всех текущих, запланированных и завершенных экскурсиях, координация экскурсий, демонстрация загруженности точек посещения, сбор аналитики и демонстрация статистики. На сегодня в системе зарегистрировано более 100 человек, связанных с проведением экскурсий. За год в ОИЯИ было проведено 220 экскурсий (рис. 11).

Рис. 11. Распределение числа проведенных в ОИЯИ экскурсий за 2022 г. по лабораториям



МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В 2022 г. облако Института ядерной физики Академии наук Узбекистана было запущено в эксплуатацию и интегрировано в JINR DICE. Приобретено и поставлено дополнительное серверное и сетевое оборудование для облачной инфраструктуры Института ядерной физики (Алма-Ата, Казахстан). Идут работы по вводу данного оборудова-

ния в эксплуатацию и расширению мощностей облака данной организации. В настоящее время полностью интегрированы в JINR DICE Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова (Россия), Северо-Осетинский государственный университет (Россия), Институт ядерной физики (Казахстан), Институт физики Националь-

Ташкент, 8 октября. Запуск кластера облачных вычислений, созданного при содействии ОИЯИ в Институте ядерной физики АН Узбекистана



ной академии наук Азербайджана, Институт ядерных исследований и ядерной энергетики (Болгария), Софийский университет им. Св. Климента Охридского, Научно-исследовательский институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, Институт ядерной физики АН РУз (Узбекистан), Египетская национальная сеть научно-технической информации Академии научных исследований и технологий (Египет), в процессе интеграции — Грузинский технический университет.

Вычислительный кластер Института математики и цифровой технологии Монгольской академии наук (IMDT MAS) был интегрирован в гетерогенную распределенную среду на базе платформы DIRAC. Это дает возможность использовать свободные ресурсы кластера в вычислениях для мегасайнс-проекта NICA.

В 2022 г. началась реализация совместного проекта ЛРБ, ЛИТ и исследовательских центров Белградского университета «Компьютерная идентификация, характеристика и моделирование гистологических данных» в рамках Соглашения о сотрудничестве между ОИЯИ и Министерством образования и науки Республики Сербии. В апреле 2022 г. состоялось рабочее совещание «Вычислительная биология и физика» (<https://indico-hlit.jinr.ru/event/310/>). Участники обсудили ряд актуальных проблем в области нейрорадиобиологии и радиологии, а также технологические и информационные средства автоматизации соответствующих исследований и обработки данных. Для реализации проекта был развернут портал BIOHLIT-Serbia: <https://it4bio.jinr.ru/>. Для решения вычислительных задач проекта активно используются ресурсы гетерогенной платформы HybriLIT.

ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА НА УЧЕБНО-ТЕСТОВОМ ПОЛИГОНЕ

В 2022 г. ресурсы платформы HybriLIT активно использовались в образовательных целях. Данное направление связано как с проведением учебных курсов для сотрудников ОИЯИ, так и для проведения практических занятий для студентов университета «Дубна», ТвГУ и др.

В 2022 г. для более чем 800 студентов проведены практические занятия по курсам «Архитектуры вычислительных систем», «Технологии высокопроизводительных вычислений», «Современные методы анализа сложных систем», «Ма-

шинное обучение и интеллектуальный анализ данных», «Языки и технологии анализа данных», «Математический аппарат и инструментарий анализа данных» с задействованием ресурсов учебно-тестового полигона и экосистемы для ML/DL/HPC, позволяющих студентам осваивать самые современные технологии разработки параллельных алгоритмов на новейших вычислительных гибридных архитектурах и инструментарий (библиотеки и фреймворки) для задач машинного и глубокого обучения [27].

Также ресурсы платформы активно использовались во время первой Осенней школы по информационным технологиям ОИЯИ, проходившей с 14 по 19 ноября в ЛИТ.

С использованием ресурсов платформы HybriLIT за 2022 г. подготовлены одна кандидатская диссертация, 8 магистерских и 4 бакалаврские работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Velikhov V. E. et al. // 2022 Intern. Sci. and Techn. Conf. "Modern Network Technologies" (MoNeTec). M., 2022. P. 1–4.
2. Zuev M. I. et al. // PoS (DLCP2022). 2022. V. 429. P. 027.
3. Kashunin I. A., Mitsyn V. V., Strizh T. A. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2022. V. 19, No. 6. P. 820–825.
4. Akishin P. G., Ladygyn V. P. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2022. V. 19, No. 6. P. 792–796.
5. Ayriyan A. S. et al. // Soft Matter. 2022. V. 38, No. 18. P. 7441–7451.
6. Zuev M. I., Serdyukova S. I. // Comput. Math. Math. Phys. 2022. V. 62, No. 1. P. 1–9.
7. Lukyanov V. K. et al. // AIP Proc. (in press).
8. Friesen A. V., Goderidze D., Kalinovsky Yu. L. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2022. V. 19, No. 4. P. 412–421.
9. Buša Jr. J. et al. // Mod. Inform. Technol. & IT-Education. 2022. V. 18, No. 1. P. 176–182.
10. Baranov D. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2022. V. 19, No. 5. P. 550–553.
11. Rusov D. I. et al. // PoS (DLCP2022). 2022. V. 429. P. 005.
12. Alexandrov E. et al. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2022. V. 19, No. 5. P. 543–546.
13. Palichik V. V., Voitishin N. N. // Phys. Part. Nucl. (in press).
14. Galoyan A., Ribon A., Uzhinsky V. // Eur. Phys. J. C. 2022. V. 82, No. 181.
15. Ivancova O. V. et al. // Quantum Soft Engineering Toolkit. Pt I: Quantum Fast Search Algorithms. Quantum Simulators on Classical Computers. Quantum Control Information Models. M.: Kurs, 2022.
16. Зрелов П. В. и др. // Программные продукты и системы. 2022. Т. 35, № 4. С. 618–630.
17. Chuluunbaatar O. et al. // Comput. Phys. Commun. 2022. V. 278. P. 108397(1–14).
18. Kircher M. et al. // Phys. Rev. Lett. 2022. V. 128. P. 053001(1–6).
19. Chuluunbaatar O. et al. // J. Quant. Spectr. Rad. Trans. 2022. V. 278. 108020(1–9).
20. Adam Gh., Adam S. // AIP Conf. Proc. (in press).
21. Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Laser Phys. Lett. 2022. V. 19. 116001.
22. Tsvetkov V. P. et al. // Chaos, Solitons and Fractals. 2022. V. 161. 112301.
23. Khvedelidze A., Torosyan A. // Zap. Nauchn. Sem. POMI. 2022. V. 517. P. 250–267.
24. Butenko A. V. et al. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2023. V. 20, No. 2. P. 183–199.
25. Anikina A. I. et al. // PoS (DLCP2022). 2022. V. 429. P. 017.
26. Uzhinskiy A., Vergel K. // Comput. Optics. 2023. V. 47. No. 1. P. 137–151.
27. Сборник отчетов о научно-проектной деятельности выпускников Международной школы по информационным технологиям «Аналитика больших данных». Вып. 3. Дубна: ОИЯИ, 2022.