

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2010 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». Сотрудники ЛИТ участвовали в исследованиях по 20 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ и международного сотрудничества ОИЯИ.

Производительность центрального информационно-вычислительного центра (ЦИВК) ОИЯИ вы-

росла на 400 kSI2K и достигла 2800 kSI2K, емкость системы хранения данных увеличена на 500 Тбайт и составила 1068 Тбайт. Эффективная организация работы грид-сайта ОИЯИ позволила ему занять место в первой десятке среди более чем 160 сайтов второго уровня глобальной грид-инфраструктуры проекта WLCG (Worldwide LHC Computing Grid). Вклад ОИЯИ в решение задач в рамках российского грида для интенсивных операций с данными, объединяющего грид-сегменты ОИЯИ и 16 ресурсных центров в российских институтах и странах-участницах ОИЯИ, составил более 40 %.

СЕТЕВАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ

В 2010 г. продолжены работы, направленные на обеспечение надежного функционирования и развития сетевой информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ. Ключевыми составляющими этой инфраструктуры являются телекоммуникационные каналы связи, локальная сеть, ЦИВК и базовое программное обеспечение, объединяющее информационно-вычислительные ресурсы Института в единую среду, доступную для всех пользователей, в том числе с использованием грид-технологий.

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ.

В 2010 г. поддерживалась надежная работа высокоскоростного канала связи Дубна–Москва. Для связи с научными сетями и Интернетом использовались следующие каналы связи: ЦЕРН (10 Гбит/с), RBnet (10 Гбит/с), GEANT (12,4 Гбит/с), московские научные сети (10 Гбит/с), RASnet (10 Гбит/с), RadioMSU (10 Гбит/с), GLORIAD (1 Гбит/с), E-арена (10 Гбит/с).

В 2010 г. продолжена поддержка узла Dubna-IX, обеспечивающего удаленный доступ сотрудников ОИЯИ по VPN из городских сетей «Ланпо-

лис», «Контакт», ТМПК и осуществляющего пиринг между городскими сетями.

На рис. 1 представлено распределение входящего и исходящего трафиков ОИЯИ с 2003 по 2010 г.

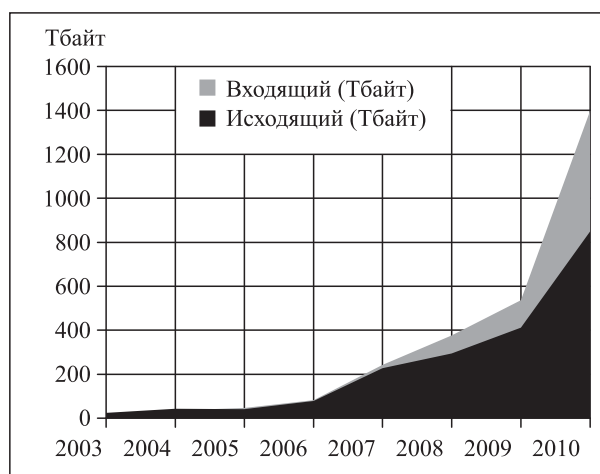


Рис. 1. Распределение входящего и исходящего трафиков ОИЯИ с 2003 по 2010 г.

Резкий рост трафика в 2010 г. связан с активизацией работы экспериментов на ЛНС.

Распределение входящего и исходящего трафиков по подразделениям ОИЯИ в 2010 г. (по входящему трафику выше 1 Тбайт) приведено в табл. 1.

Таблица 1

Подразделение	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт
ЛФВЭ	45,74	87,73
ЛИТ	45,53	39,38
ЛЯП	42,71	66,45
ЛНФ	28,18	49,04
ЛТФ	15,97	16,82
Узел удаленного доступа	10,72	3,04
Управление	8,89	7,35
ЛЯР	6,42	2,9
ЛРБ	5,71	1,59
Университет «Дубна»	3,98	5,78
НЦПИ	2,62	5,17
УНЦ	2,18	0,91

Общий входящий трафик ОИЯИ, включающий серверы общего доступа и ЦИВК, составил в 2010 г. 1399,02 Тбайт (536,15 Тбайт в 2009 г.). Процентное распределение входящего трафика по категориям приведено в табл. 2.

Локальная сеть ОИЯИ. В ЛИТ ведется систематическая работа, направленная как на постоянное совершенствование и повышение отказоустойчивости ядра телекоммуникационной структуры локальной вычислительной сети (ЛВС), так и на обеспечение существенного увеличения информационных потоков и уровня безопасности. В 2010 г. наряду с усовершенствованием и оптимизацией внешнего канала передачи данных и опорной сети ЛВС проводились работы по предоставлению в тестовом варианте централизованного беспроводного доступа в ОИЯИ, централизованных услуг VoIP и Video Conferencing. Реализован первый этап перехода в опорной сети ОИЯИ на 10 Гбит/с. В 2010 г. на эту скорость переведены три лаборатории: ЛИТ, ЛФВЭ и ЛЯП.

ЛВС ОИЯИ содержит 6988 компьютеров и вычислительных узлов. В 2010 г. зарегистрировано 3726 пользователей сети, более 1500 пользователей сервиса mail.jinr.ru и около 1300 пользователей удаленного доступа VPN. Продолжены модернизация и сопровождение разработанного в ЛИТ программного комплекса IPDB — сетевой базы данных с множе-

ственными функциями мониторинга и управления на основе IP-адресов. IPDB является основным инструментом для сетевых и системных администраторов при обслуживании ЛВС ОИЯИ.

Мониторинг инфраструктуры ЛВС ОИЯИ — одна из важнейших задач в обеспечении надежного функционирования всей инфраструктуры. Разработана и запущена в эксплуатацию первая версия системы локального мониторинга (NMIS) с графическим веб-интерфейсом (рис. 2). Эта система обеспечивает в режиме реального времени мониторинг важнейших элементов сети: маршрутизаторов, сетевых коммутаторов, климатических установок, источников бесперебойного питания, серверов DNS, dCache-серверов, серверов баз данных, RAID, серверов WLCG, вычислительных узлов и т.д. Более 350 узлов локальной сети ЛИТ находятся на круглосуточном контроле в системе NMIS.

Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ. В 2010 г. продолжено наращивание производительности и систем хранения данных ЦИВК ОИЯИ, базирующегося на распределенной модели хранения и обработки данных. ЦИВК ОИЯИ организован как единый информационно-вычислительный ресурс, предназначенный для обеспечения всех направлений деятельности Института. Счетные ресурсы и ресурсы для хранения данных управляются базовым программным обеспечением (БПО). Настройки БПО ЦИВК обеспечивают оптимальное использование счетных ресурсов и поддержку наиболее универсальных и защищенных методов доступа к хранилищам данных. Распределение и учет счетных ресурсов реализованы на основе системы пакетной обработки torque и планировщика ресурсов maui.

В настоящее время вычислительная ферма ЦИВК состоит из 1104 64-битных центральных процессоров. Все вычислительные узлы доступны пользователям ЦИВК и пользователям грид-среды через единую систему пакетной обработки заданий. В 2010 г. введена в строй новая система климатического контроля ЦИВК ОИЯИ.

В состав ЦИВК включены пять интерактивных машин для обеспечения доступа к ресурсам ЦИВК пользователям. Имеется ряд серверов поддержки работы пользователей и служб ОИЯИ: batch, WWW, баз данных mysql и Oracle; e-mail; DNS и др.

Основная система для хранения больших объемов данных ЦИВК — это аппаратно-программный комплекс dCache. В него включены 32 системы хранения данных общей емкостью ~ 600 Тбайт. Введена

Таблица 2

Научно-образовательные сети	Файлообмен (torrent, ftp)	Веб-ресурсы	Социальные сети	Программное обеспечение	Мультимедиа	Обмен с сетями Дубны
89,24	8,63	1,45	0,25	0,21	0,17	0,05

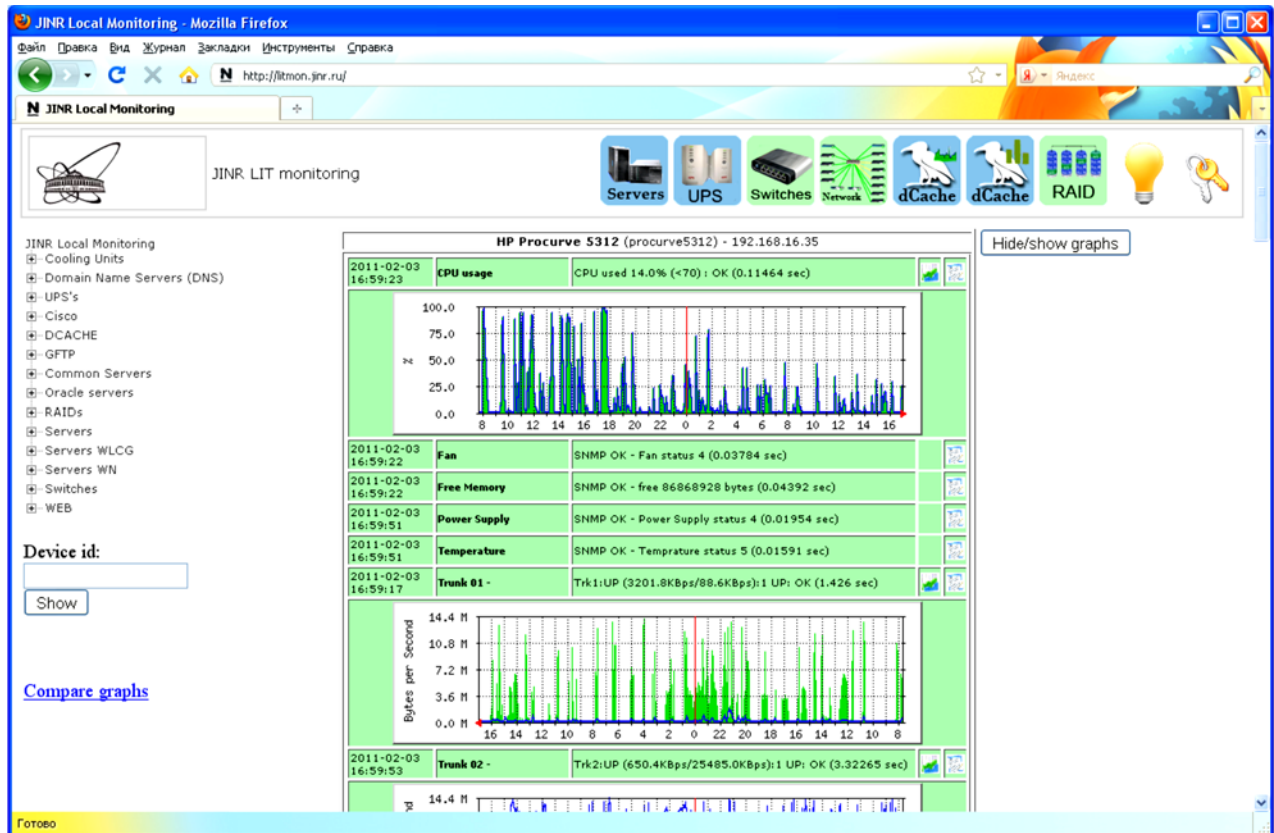


Рис. 2. Веб-интерфейс системы локального мониторинга

Таблица 3

Лаборатории/группы	ЛИТ	ЛТФ	ЛЯП	ЛНФ	МРД	ЛФВЭ	СВМ	PANDA	ЛЯР
Процессорное время, kSi2K · ч	459733,92	207786,00	166082,38	84794,83	35793,66	4395,21	316,51	6,34	4,4
Число заданий	2013	1688	106	716	10764	1090	123	704	13
Астрономическое время, kSi2K · ч	370271,94	210619,64	3591,58	35639,36	38132,28	4509,36	394,62	436,38	0,92

в строй система мониторинга системы хранения данных в режиме реального времени, позволяющая получать оперативную информацию о заполнении пользователями дискового пространства. Несколько пользовательских групп ЦИВК используют систему доступа к удаленной информации XROOTD. Для обеспечения работы XROOTD создан аппаратно-программный комплекс общей емкостью порядка 175 Тбайт. Все системы хранения данных общей емкостью 1 Пбайт построены с использованием аппаратного механизма RAID6. Доступная пользователям емкость систем хранения данных составляет порядка 800 Тбайт.

Для обслуживания сайта WLCG в ОИЯИ установлено 24 сервера под системой gLite. Кроме функций поддержки работы самого сайта JINR-LCG2 часть серверов реализует сервисы и функции поддержки российского сегмента проектов WLCG и EGI.

Центральный маршрутизатор сети ЦИВК соединен с основным граничным маршрутизатором сети ОИЯИ на скорости 10 Гбит Ethernet. Для обеспечения высокой пропускной способности локальной сети ЦИВК и минимального времени доступа к данным и файлам применяется агрегирование нескольких соединений 1 Гбит Ethernet в единый виртуальный канал (TRUNK) с увеличенной пропускной способностью от 4 до 8 Гбит Ethernet.

В табл. 3 приведено распределение пакетных заданий в 2010 г. по подразделениям Института и группам пользователей, за исключением задач грид-среды.

Грид-среда ОИЯИ. ОИЯИ активно участвует в крупномасштабных всемирных грид-проектах: «Всемирный вычислительный грид для LHC» (WLCG, <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>), «Развертывание гридов для e-науки» (EGEE, <http://www.eu-egee.org/>) и в его продолжении — проекте «Европейская грид-инфраструктура» (EGI-InSPIRE — Integrated Sustain-

able Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe, <http://www.egi.eu/projects/egi-inspire/>).

Участие в этих проектах включает поддержку и развитие грид-инфраструктуры ОИЯИ в соответствии с требованиями экспериментов на ЛНС, тестирование и экспертную оценку промежуточного программного обеспечения WLCG, разработку инструментария для мониторинга грид-среды, развитие базы данных моделированных физических событий, обучение пользователей грид-инфраструктуры, поддержку стран участниц ОИЯИ в их деятельности по проекту WLCG и др.

С 2004 г. ЦИВК ОИЯИ является составным элементом мировой вычислительной грид-инфраструктуры и входит в инфраструктуру российского грида для интенсивных операций с данными (RDIG). В 2010 г. около 40 % от полного времени ЦПУ, затраченного в российской грид-инфраструктуре на задачи ЛНС, было обеспечено грид-сайтом ОИЯИ — JINR-LCG2. Наш сайт является одним из наиболее эффективных сайтов уровня Tier2 инфраструктуры WLCG и регулярно занимает (по результатам независимого мониторинга) место в первой десятке из более 160 Tier2-сайтов.

В 2010 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 2010 г. грид-инфраструктуры ЦИВК ОИЯИ виртуальными организациями (ВО), входящими в RDIG/WLCG/EGI.

Таблица 4

ВО	Процессорное время, kSi2K · ч	Число заданий
ATLAS	5204619,87	777996
ALICE	2949151,97	234057
CMS	2472183,90	479948
LHCb	1955205,91	68707
Fusion	497976,03	9108
BioMed	156795,87	26142
HONE	89959,07	7702
ops	2655,99	66217
dteam	16,22	6595
Всего	13328564,84	1676472

Дальнейшее развитие получила система мониторинга и учета использования ресурсов инфраструктуры RDIG, разработанная и сопровождаемая ОИЯИ (<http://rosmon.jinr.ru:8080>).

Большой вклад сотрудники ОИЯИ вносят в развитие системы мониторинга для виртуальных организаций ЛНС (Dashboard), разрабатываемой и поддерживаемой в отделении информационных технологий в ЦЕРН [1]. Эта система позволяет получать данные, используемые для визуализации работы грид-инфраструктуры (статическую информацию о грид-сайтах с их координатами, число посланных и завершенных заданий на сайте, число считаемых в данный

момент задач и информацию о передаче данных в грид-среде).

В настоящее время грид-сайт ОИЯИ является лучшим из всех сайтов RDIG. Наш вклад в обработку заданий экспериментов ALICE, ATLAS и CMS в 2010 г. приведен на диаграммах рис. 3.

Продолжено развитие и сопровождение базы данных моделированных событий для проекта LCG — LCG MCDB (LCG Monte-Carlo Events Data Base). В настоящее время она активно используется в эксперименте CMS. Для автоматизации процесса моделирования на базе языка XML разработан специализированный язык HerML [2].

В 2010 г. совместно с ЦЕРН проведены работы по разработке одного из центральных сервисов системы управления данными эксперимента ATLAS (DQ2) — сервиса удаления данных (Deletion Service), который предназначен для централизованного удаления данных эксперимента ATLAS на сайтах Tier0–Tier1–Tier2. Использование веб-сервисных технологий позволило создать масштабируемую систему, а также обеспечить интеграцию сервиса удаления данных с другими сервисами DQ2. Реализованы подсистемы мониторинга сервиса и интерфейс просмотра и поиска ошибок. С ноября 2010 г. все сайты уровня Tier 0–Tier 1–Tier 2 эксперимента ATLAS обслуживаются обновленным сервисом удаления данных. В сутки в рамках всей грид-инфраструктуры ATLAS удаляются около 1 000 000 файлов общим объемом 300 Тбайт.

Разработка и запуск прототипа системы удаленного доступа для мониторинга в реальном времени процессов сбора и обработки данных в ATLAS — Control Room — результат многолетнего сотрудничества ОИЯИ–ЦЕРН по проекту TDAQ ATLAS. Эта система предоставляет уникальные возможности по использованию ее в будущем как аппаратно-программной платформы для разработки системы моделирования в реальных условиях работы вычислительного комплекса в распределенной среде.

Кроме экспериментов на ЛНС грид-сайт ОИЯИ обслуживает еще шесть виртуальных организаций, входящих в инфраструктуру RDIG.

В конце 2010 г. был успешно проведен первый сеанс массового моделирования событий для эксперимента CBM (FAIR) в рамках CBMGRID на сайтах ОИЯИ и GSI. По программе UrQMD выполнено моделирование 5 000 000 событий (35 АГэВ Au–Au).

ОИЯИ в сотрудничестве с девятью ресурсными центрами в разных регионах России участвовал в проекте «ГридННС» (Грид национальной нанотехнологической сети), который выполнялся в рамках федеральной целевой программы «Развитие инфраструктуры наноиндустрии в Российской Федерации на 2008–2010 гг.». Задачами ОИЯИ в этом проекте являлись мониторинг и эккаунтинг, поддержка системы регистрации грид-сервисов и сайтов, поддержка виртуальных организаций.

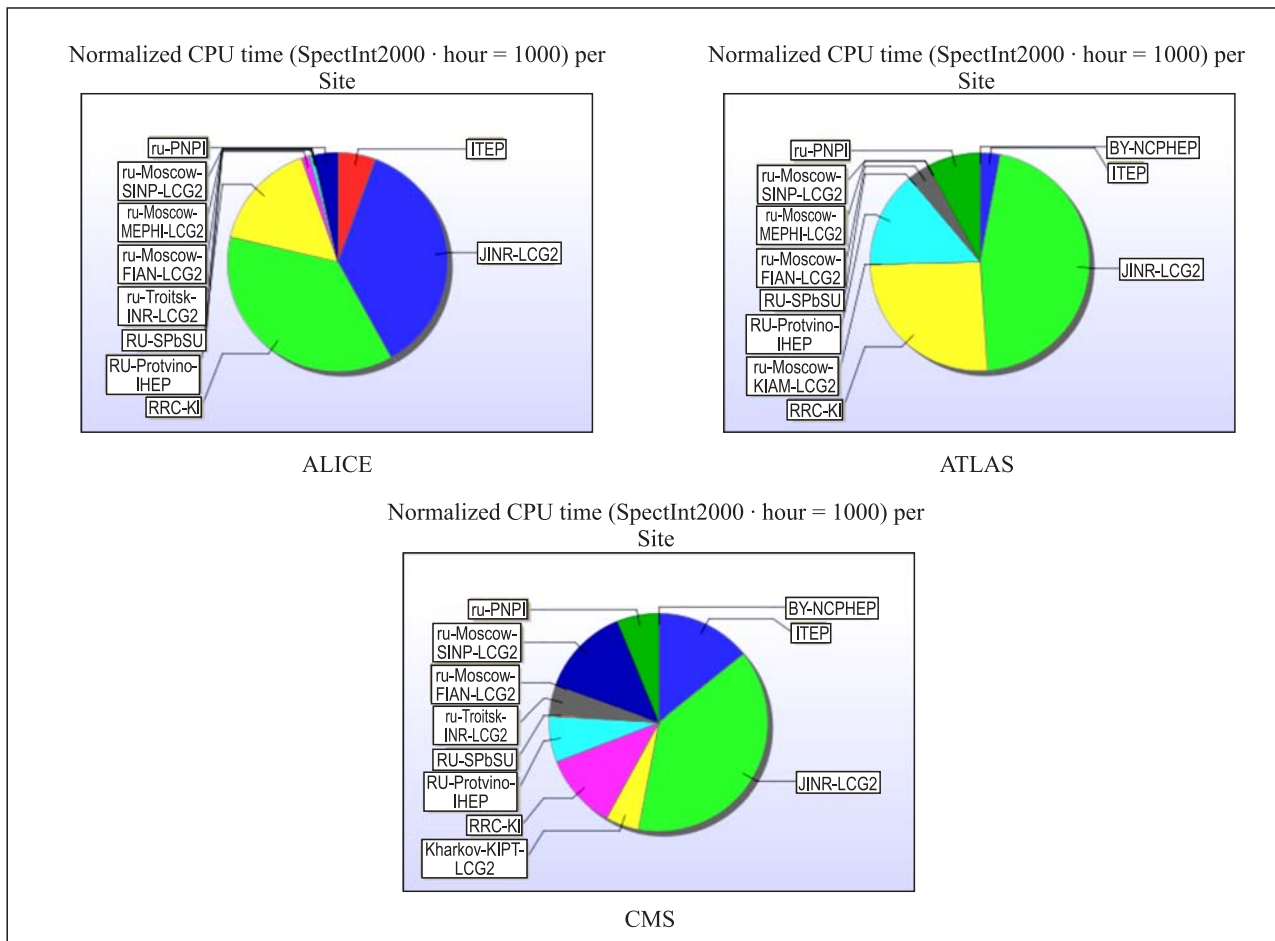


Рис. 3. Вклад ОИЯИ в обработку заданий экспериментов ALICE, ATLAS и CMS в 2010 г. в рамках консорциума RDIG

Для обучения пользователей и системных администраторов работе в грид-среде в ЛИТ ОИЯИ функционирует учебная инфраструктура (<http://gridedu.jinr.ru>), которая позволяет пользователям получить опыт работы с современным программным обеспечением промежуточного уровня грида. Эта распределенная инфраструктура объединяет в настоящий момент восемь сайтов в странах-участницах ОИЯИ и является первым шагом на пути создания интегрированной грид-инфраструктуры стран-участниц ОИЯИ.

В 2010 г. разработан информационный Интернет-портал «Грид в ОИЯИ» (<http://grid.jinr.ru>), в котором находит отражение деятельность ОИЯИ в области грид-технологий.

Информационная и программная поддержка. Информационная, программная и алгоритмическая поддержка научно-производственной деятельности ОИЯИ — традиционное направление исследований ЛИТ. Эта деятельность включает, в частности, развитие и поддержку информационных WWW/FTP/DBMS-серверов ОИЯИ и ЛИТ, создание и хранение электронных документов, связанных с научной и административной деятельностью

ОИЯИ. Проводится обновление программной среды, регулярное сопровождение и модернизация баз данных административно-хозяйственного профиля (совместно с НТО АСУ ОИЯИ).

В 2010 г. были проведены работы по созданию и поддержке различных информационных сайтов, сайтов конференций, совещаний, симпозиумов 2010 г., организаторами которых являлись лаборатории ОИЯИ (по их заявкам). В частности, такие работы были проведены для 18-го Международного семинара по взаимодействию нейтронов с ядрами, Дубна, 26–29 мая 2010 г. (<http://isinn.jinr.ru/>), Крымской конференции (из серии международных конференций по современным проблемам генетики, радиобиологии, радиэкологии и эволюции), Алушта, Украина, 9–14 октября 2010 г. (http://lrb.jinr.ru/Timofeeff/Alushta/Menu/MenuSet_r_10.htm), IV Международной школы по нейтринной физике им. Б.М. Понтекорво, Алушта, Украина, 26 сентября – 6 октября 2010 г. (<http://pontecorvosch.jinr.ru/index.html>), 4-й Международной конференции по физике и химии трансактинидных элементов, Сочи, Россия, 5–11 сентября 2011 г. (<http://tan11.jinr.ru/>), 4-й Международной конференции «Распределенные вычисле-

ния и грид-технологии в науке и образовании», GRID'2010, Дубна, 28 июня – 3 июля 2010 г. (<http://grid2010.jinr.ru/>), 5-го Международного симпозиума по ядерной метрологии как «инструмента» радиоэкологии, Дубна, 20–23 октября 2010 г. (<http://insinume2010.jinr.ru/>) и др.

Введена в режим опытной эксплуатации система электронного документооборота Doctor-Doc, разработанная для внутреннего безбумажного документооборота в ЛИТ. Система имеет процесс-ориентированную структуру, обладающую рядом преимуществ перед существующими сервис-ориентированными системами. Обновлена техническая база системы, расширены возможности информационной системы. Продолжалась работа по обслуживанию и модернизации портала журналов «Физика элементарных частиц и атомного ядра» и «Письма в ЭЧАЯ».

В 2010 г. выпущен очередной информационный бюллетень ЛИТ. Электронная версия бюллетеня доступна на ЛИТ-сайте http://lit.jinr.ru/Inf_Bul_5/.

Другое традиционное направление деятельности ЛИТ — это развитие и сопровождение библиотеки JINRLIB, сопровождение библиотек программ (CERNLIB, CPC Program Library), разработанных другими научными центрами и организациями, а также оказание информационной и технической помощи пользователям. Информация о библиотеках программ ОИЯИ содержится на специализированном веб-сервере <http://www.jinr.ru/programs/>. В 2010 г. JINRLIB пополнилась новыми программами, создан-

ными в ОИЯИ: SLIPM (программный комплекс на языке MAPLE для численного решения частичной проблемы Штурма–Лиувилля на основе непрерывного аналога метода Ньютона), BioDosimetry (программа для обработки и анализа данных радиационной биологической дозиметрии и автоматического расчета доз облучения), новыми версиями программ SAS (программа для первичной обработки спектров малоуглового рассеяния), FITTER (программа для фитирования экспериментальных данных) и Gluplot (программа для визуализации данных).

Продолжались исследования применения технологий параллельных вычислений (MPI, OpenMP, GPU) при распараллеливании больших вычислительных программ. Подготовлены и опубликованы в информационном бюллетене и на сайте ЛИТ методические указания по работе с MPI на вычислительном кластере ЦИВК ОИЯИ (<http://lit.jinr.ru/view.php?lang=lat&var1=comp&var2=ccic&file=ccic/recom/compilat&menu=ccic/menu>).

Заключены соглашения ОИЯИ с фирмами Autodesk и Siemens PLM на приобретение лицензионного программного обеспечения. Для лабораторий ОИЯИ приобретены лицензии (сетевые и однопользовательские) на программные продукты компании Autodesk Inventor Suite 2010/2011, Autodesk Inventor Professional 2010/2011 (русские, английские версии и версии для учебных заведений). Сетевые лицензии размещены на сервере лицензий iis1.jinr.ru. Проведены курсы по обучению начинающих и опытных пользователей Autodesk Inventor.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Главная цель данного направления исследований в ЛИТ — это обеспечение математической, алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. В 2010 г. по результатам исследований опубликовано более 200 статей, из них 89 в реферируемых журналах. На международных конференциях представлено более 90 докладов. Ниже приведена краткая информация о некоторых из полученных результатов.

В [3] предложен алгоритм для оценки периода полураспада дочернего ядра в случае, когда неизвестно, какое ядро является для него материнским. Метод может быть применен в экспериментах с ядерными реакциями полного слияния, индуцированными тяжелыми ионами, если обнаруживаются последовательности редких распадов гесой-альфа (и/или спонтанного деления) и при этом наблюдается более одного статистически значимого гесой-кандидата для таких событий.

Проведены расчеты дифференциальных сечений упругого рассеяния K^+ на ядрах ^{12}C и ^{40}Ca при

энергиях 0,635, 0,715 и 0,8 ГэВ/с с использованием микроскопического оптического потенциала высокоэнергетического приближения, в котором учтены известные из экспериментов данные каон-нуклонных амплитуд, а также функции распределения точечных нуклонов ядра-мишени. Изучены различные методы релятивизации, показана необходимость ее учета. Получено согласие проведенных с использованием предложенной модели расчетов и экспериментальных данных [4].

С помощью микроскопической модели оптического потенциала (ОП) проанализировано упругое рассеяние $^6\text{He}+^{12}\text{C}$ при $E = 3, 38,3$ и $41,6$ МэВ/нуклон. В таком подходе подгоняются два или три параметра, перенормирующие глубину реальной, мнимой и поверхностной частей рассчитываемого ОП. При этом остается неоднозначность получаемых наборов параметров подгонки, которую, однако, удается сузить, вводя дополнительный критерий отбора — зависимость объемных интегралов ОП от энергии. Обсуждается структура полученных ОП, роль ядерной среды в формировании мнимой

части ОП, связь поверхностного потенциала с каналами развала ${}^6\text{He}$ [5].

Разработан быстрый алгоритм глобальной реконструкции треков для эксперимента CBM (Compressed Baryonic Matter) на ускорителе FAIR в Дармштадте. Глобальная реконструкция треков основана на методах слежения по треку и на фильтре Калмана. Эффективность реконструкции треков для центральных столкновений Au–Au при энергии 25 ГэВ/нуклон, смоделированных с помощью UrQMD, составляет 93–95% [6]. Параллельная реализация алгоритма, использующая возможности архитектуры современных процессоров, и многопоточность позволили получить почти 500-кратное уменьшение времени обработки одного события по сравнению с традиционными методами обработки (с 730 до 1,5 мс/соб.) для двухъядерных процессоров Intel Core i7 (2,66 ГГц) [7].

Разработаны алгоритмы и подходы для решения задачи идентификации электронов и подавления пионов с помощью детектора переходного излучения TRD (Transition Radiation Detector) эксперимента CBM. Рассмотрены характерные свойства энергетических потерь электронов и пионов в слоях TRD и особенности применения искусственных нейронных сетей и статистических методов для решения поставленной задачи [8].

Получено обобщение теории рассеяния нескольких квантовых частиц на случай их кулоновского взаимодействия. Сформулирован метод регуляризации (устранения расходимостей) интегралов, описывающих члены ряда теории возмущений при различных возмущающих потенциалах. В качестве примера приведен расчет дифференциальных сечений квазиупругой реакции ионизации атома водорода быстрым электроном [9].

Рассчитана вероятность распада каона на пионы, нейтрино и лептонный атом. Полученные результаты используются для оценки фона в эксперименте NA-62 по изучению процессов распада K -мезона на π -мезон и нейтрино-антинейтринную пару [10].

Построена модификация пробной кулоновской функции непрерывного спектра электронов в трехатомных молекулах и в их ионах. Функция представлена в виде произведения трех кулоновских функций непрерывного спектра и используется в рамках первого борновского приближения для вычисления многократных дифференциальных сечений $(e, 2e)$ -ионизации $1\pi_g$ -орбитали CO_2 . Выполнен анализ и получено хорошее описание новых экспериментальных данных в окрестности бинарного пика (рис. 4). Также исследована ионизация внутренних $1\pi_u$ - и $3\sigma_u$ -орбиталей CO_2 [11]. Исследование изменения многократных дифференциальных сечений в зависимости от направления рассеянного и испущенного электронов в случае ориентируемых мишеней с тремя центрами показывает наличие интерферен-

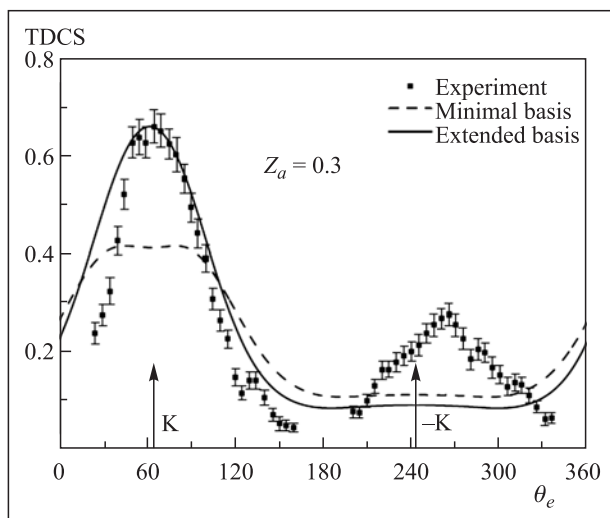


Рис. 4. Трехкратные дифференциальные сечения реакции $(e, 2e)$ из молекулярной орбитали $1\pi_g$ как функции угла вылета испущенного электрона θ_e при значении параметра $Z_a = 0,3$. Экспериментальные данные взяты из работы *Lahmam-Bennani A., Staicu Casagrande E. M., Naja A.* (J. Phys. B. 2009. V.42. P.235205-1-7) при значениях энергии испущенного электрона $E_e = 37$ эВ и рассеянного электрона $E_s = 500$ эВ. Сплошная линия — набор расширенных базисных функций ($1s, 2s, 2p, 3d$), штриховая — набор минимальных базисных функций ($1s, 2s, 2p$)

ционных эффектов, таких же, как и при дифракции света на трех отверстиях.

Для численного моделирования процессов, происходящих при прохождении тяжелых ионов через конденсированные среды, принципиальное значение имеет время прохождения иона от облучаемой поверхности до его полной остановки в мишени. Выполненные расчеты показали, что время прохождения ионов урана с энергией 700 МэВ в никелевой мишени составляет $\Delta t \approx 4 \cdot 10^{-12}$ с. В предыдущих работах не учитывалось движение иона внутри материала и использовалась функция источника со временем действия $\Delta t \approx 10^{-14}$ с. Предложена модель термического пика с функцией источника, учитывающей прохождение иона через облучаемый слой материала. Приведены результаты расчетов при облучении никелевой мишени ионами урана с энергией 700 МэВ и сделан сравнительный анализ с предыдущими результатами, где не учитывалось перемещение иона внутри материала [12].

Рассмотрено использование техники уравнения движения функций Грина для строгого решения эффективной двухзонной модели Хаббарда высокотемпературной сверхпроводимости в приближении среднего поля в купратах, которая недавно была модифицирована авторами для включения надлежащих граничных условий при нулевом легировании. Энергетические спектры, полученные как для нормального

состояния, так и для состояния сверхпроводимости, являются конечными по всей доступной области легирования независимо от вида легирования (дырочное или электронное) купратов. Выявлено, что вызванная прыжковой электропроводностью гибридизация энергетических уровней нормальных состояний сохраняет центр тяжести негибридизированных уровней. Однако вызванная прыжковой электропроводностью гибридизация энергетических уровней состояния сверхпроводимости при данном импульсе q в зоне Бриллюэна перемещает центр тяжести гибридризованных нормальных уровней. Это согласуется с полным смещением энергетического спектра состояния сверхпроводимости, обнаруженным в оптических измерениях очень высокой точности [13].

Разработана вычислительная схема решения эллиптических краевых задач с аксиально-симметричными ограничивающими потенциалами, использующая различные наборы однопараметрических базисных функций. Эффективность предложенных символьно-численных алгоритмов, осуществленных в MAPLE, показана на примерах моделей сфероидальных квантовых точек, для которых были вычислены энергетические спектры и соответствующие собственные функции в зависимости от отношения полуосей сфероидов в рамках приближения эффективных масс. С использованием точной и адиабатической классификации обнаружены критические значения отношения полуосей сфероидов, для которых дискретный спектр моделей

с потенциалами стенки конечной высоты переходит в непрерывный в режиме сильного размерного квантования [14].

Разработаны и программно реализованы на языке системы Maple эффективные символьные алгоритмы для декомпозиции систем нелинейных уравнений в частных производных на конечное число инволютивных подсистем с непересекающимися пространствами. Такая декомпозиция позволяет за конечное число математических операций проверить совместность исходной нелинейной системы уравнений (т.е. наличие у нее решений) и облегчает ее решение как аналитически (когда это возможно), так и численно. Кроме того, как результат, развит новый алгоритмический подход к построению конечно-разностных аппроксимаций для линейных систем уравнений в частных производных [15].

Изучена самосогласованная система взаимодействующих спинорного и скалярного полей в пространстве типа Бианки-VI (B-VI) в присутствии космологической постоянной. Найдены точные решения уравнений спинорного, скалярного и гравитационного полей для некоторых специальных выборов нелинейности спинорного поля. Показано, что введение положительной космологической постоянной, что часто используется для моделирования темной энергии, приводит к быстрому расширению Вселенной, тогда как отрицательная космологическая постоянная генерирует осциллирующую или непериодическую Вселенную. Если предполагать, что метрические функции a и b обратно пропорциональны

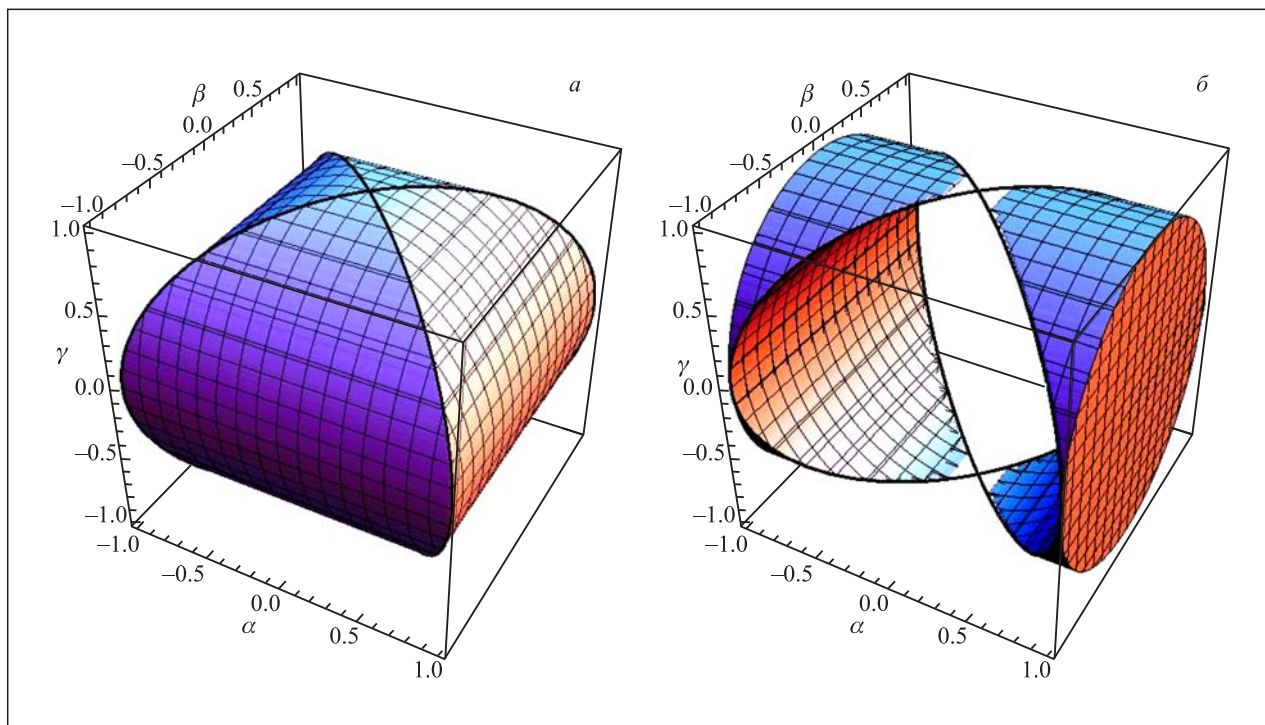


Рис. 5. Области расщепленности (а) и перепутанности (б) для одного из трехпараметрических семейств матрицы плотности

друг другу ($ab = 1$), то получаем модель Вселенной, свободную от сингулярной независимости [16].

В основе квантового компьютеринга и квантовой информатики лежит такое чисто квантовое явление, как «перепутывание» составных частей композитной квантовой системы. Главными задачами исследования таких перепутанных систем являются их идентификация, классификация и количественная характеристика степени (меры) перепутанности, чтобы понять нелокальные корреляции, обусловленные перепутанностью. В [17] были получены алгебраические

соотношения на матрицу плотности для смешанной двухкубитной системы, принимающие во внимание все физические ограничения на структуру этой матрицы. С помощью этих алгебраических условий легко проверять, является ли заданное состояние двухкубитной системы перепутанным или расцепленным (не перепутанным). Пример областей расцепленности (a) и перепутанности (b) для одного из трехпараметрических семейств матрицы плотности приведен на рис. 5.

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

Исследования и работы ЛИТ проходят в тесном сотрудничестве с учеными и специалистами стран-участниц ОИЯИ, а также со многими научными центрами других стран. Наряду с работами [4–7, 11, 15] отметим некоторые дополнительные примеры такого сотрудничества.

В рамках соглашения о сотрудничестве ОИЯИ с научными центрами ЮАР в ЛИТ ОИЯИ проводится теоретическое и численное исследование нелинейного уравнения Шредингера с диссипацией и параметрической накачкой, имеющего множество приложений для моделирования резонансных явлений в нелинейных средах. Найдена и исследована область параметров диссипации и накачки, где сосуществуют различные классы устойчивых локализованных структур: стационарные двухсолитонные комплексы, периодические по времени двухсолитонные структуры, квазипериодические комплексы [18].

Сотрудниками ЛИТ, Софийского университета им. Св. Климента Охридского и ЛТФ выполнено математическое моделирование статических распределений магнитного потока в длинных джозефсоновских контактах (ДК) с учетом второй гармоники в разложении джозефсоновского тока. Для анализа устойчивости каждому конкретному распределению магнитного потока в контакте ставится в соответствие спектральная задача Штурма–Лиувилля, обращение минимального собственного значения которой в нуль отвечает бифуркации распределения по одному из параметров задачи. Численное решение соответствующей нелинейной краевой задачи проводится при помощи непрерывного аналога метода Ньютона с использованием сплайн-коллокационной

схемы для линеаризованных задач на каждой ньютоновской итерации. Найдены основные распределения магнитного потока и исследована их устойчивость при изменении параметров модели. Приведено сравнение полученных результатов с результатами традиционной модели для ДК типа сверхпроводник–изолятор–сверхпроводник [19].

В работе «Использование GPU в научных вычислениях», выполненной в ЛИТ совместно с сотрудниками Технического университета, г. Кошице, Словакия, представлена реализация на OpenCL (Open Computing Language) алгоритма вычисления доступной площади поверхности и объема макромолекулы с учетом внутримолекулярных полостей. Разработанная программа предназначена для решения задач молекулярного моделирования и основана на модификациях алгоритма, позволяющих использовать возможности параллельных вычислений в OpenCL. Преимуществом созданной программы является ее универсальность: вычисления можно проводить на всех устройствах, поддерживающих стандарт OpenCL. Ранее данный алгоритм, использующий стереографическое проектирование сфер на плоскость, был реализован на языке FORTRAN. Приведено сравнение этих двух программ и показаны преимущества реализации алгоритма на графическом процессоре NVIDIA GeForce GTX285 [20].

В сентябре 2010 г. в рамках международного сотрудничества в УНЦ ОИЯИ проведен цикл занятий со студентами из ЮАР по практическому изучению технологии MPI на компьютерах УНЦ и вычислительном кластере ЦИВК ОИЯИ.

СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

25–30 января 2010 г. на базе Лаборатории информационных технологий ОИЯИ проведена 17-я Международная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Более 350 человек приехали со всех концов России и из ближнего зарубежья для уча-

ствия в конференции. Они собрались, чтобы обсудить профессиональные вопросы и современные проблемы в различных областях математики и образования, в сфере использования информационных технологий, моделирования сложных биологических си-

стем и экономических процессов. На нынешней конференции проходили заседания по следующим секциям: математические теории, вычислительные методы и математическое моделирование, анализ сложных биологических систем — эксперимент и модели, математические методы в экономике (экономифизика), анализ и моделирование экономических и социальных процессов, гуманитарное и естественно-научное образование.

С 28 июня по 3 июля 2010 г. в Лаборатории информационных технологий проходила международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании». Она была посвящена 80-летию со дня рождения выдающегося ученого, члена-корреспондента Академии наук СССР Николая Николаевича Говоруна, бывшего заместителя директора и директора Лаборатории вычислительной техники и автоматизации. Настоящая конференция была четвертой, проводимой ЛИТ по данной тематике раз в два года. Организуемая ЛИТ при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований конференция с каждым разом привлекает все больше специалистов. Ее программа включала не только вопросы, связанные с созданием и эксплуатацией грид-инфраструктур и грид-приложений, но и теоретические и практиче-

ские аспекты применения распределенных вычислительных комплексов, распределенной обработки данных и др. С новыми решениями в области информационных технологий участники конференции познакомили спонсоры конференции — компании «Ниагара» и «Супермикро». В этом году на конференцию собрались 252 участника из 21 страны. Россия была представлена участниками из 56 университетов и исследовательских центров.

На конференции была организована работа восьми секций: WLCG — Всемирный грид для обработки данных с Большого адронного коллайдера в ЦЕРН, грид-приложения, грид в бизнесе, распределенные вычисления и грид-технологии в образовании, ГридННС — грид национальной нанотехнологической сети, распределенные вычисления: методы и алгоритмы, грид-инфраструктура и «облачные» вычисления. Были проведены круглые столы по использованию грид-технологий в бизнесе и по обучению грид-технологиям и их применению в образовании. Во время конференции был также проведен тренинг на тему «Интегрированная инфраструктура, инструменты и методы для поддержки разработки научных приложений в грид и системах добровольных распределенных вычислений».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Andreeva J. et al.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2010. 219 062002. doi: 10.1088/1742-6596/219/6/062002
2. *Belov S. et al.* // Comp. Phys. Commun. 2010. V. 181. No. 10. P. 1758–1768.
3. *Злоказов В. Б., Цыганов Ю. С.* // Письма в ЭЧАЯ. 2010. Т. 7, № 6(162). С. 658–666.
4. *Земляная Е. В. и др.* // ЯФ. 2010. Т. 73, № 8. С. 1489–1496.
5. *Lukyanov V. K. et al.* // Phys. Rev. C. 2010. V. 82. P. 024604-1–024604-11.
6. *Lebedev A. et al.* // Bull. PFUR. Ser. Math. Inform. Sci. Phys. 2010. No. 2(2). P. 59–63.
7. *Lebedev A. et al.* // Part. Nucl., Lett. 2010. V. 7, No. 4(160). P. 473–482.
8. *Akishina E. P. et al.* // Bull. PFUR. Ser. Math. Inform. Sci. Phys. 2010. No. 2(2). P. 76–84.
9. *Чулуунбаатар О. и др.* // ЭЧАЯ. 2010. Т. 41, вып. 2. С. 607–650.
10. *Gevorkyan S. R., Tarasov A. V., Voskresenskaya O. O.* // Phys. Lett. B. 2010. V. 688. P. 192–194.
11. *Chuluunbaatar O., Joulakian B.* // J. Phys. B. 2010. V. 43. P. 155201-1-8.
12. *Амирханов И. В. и др.* // Вестн. РУДН. Сер. Матем. Информ. Физ. 2010. Т. 2(2). С. 85–89.
13. *Adam Gh., Adam S.* // Romanian J. Phys. 2010. V. 55(5–6). P. 481–492.
14. *Gusev A. A. et al.* // Lect. Notes Comp. Sci. 2010. V. 6244. P. 106–122.
15. *Gerdt V. P.* // J. Math. Sci. 2010. V. 168, No. 3. P. 362–367;
Bächler T. et al. // Lect. Notes Comp. Sci. 2010. V. 6264. P. 31–54;
Gerdt V. P., Robertz D. // Proc. of ISSAC-2010. ACM Press, 2010. P. 53–59.
16. *Saha B.* // Gravitation and Cosmology. 2010. V. 16, No. 2. P. 160–167.
17. *Gerdt V. P., Khvedelidze A. M., Palii Yu.* // J. Math. Sci. 2010. V. 168, No. 3. P. 368–378.
18. *Zemlyanaya E. V., Alexeeva A. N., van Heerden T. C.* // Bull. RFUR Ser. Meth. Inform. Sci. Phys. 2010. V. 3(2). P. 136–142.
19. *Атанасова П. Х. и др.* // Вестн. РУДН. Сер. Матем. Информ. Физ. 2010. Т. 2(2). С. 108–112;
Atanasov P. Kh. et al. arXiv:1007.4778v1. 2010;
Atanasov P. Kh. et al. arXiv:1007.4778v1. 2010;
Atanasov P. Kh. et al. arXiv:1005.5691v1. 2010.
20. *Buša J. Jr., Buša J., Hayryan E.* // Proc. of Intern. Conf. on Applied Electrical Engineering and Informatics. AEI-2010. Košice, Slovakia, 2010. P. 112–116.