



## ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2015 г. Лабораторией информационных технологий в рамках направления «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 30 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ. Деятельность ЛИТ призвана обеспечить развитие сетевой информационно-вычислительной инфраструктуры, математическое и программное обеспечение научно-производственной деятельности Института и стран-участниц ОИЯИ на базе современных информационных и вычислительных технологий.

26 марта в ЛИТ состоялась презентация центра уровня Tier-1 для обработки данных эксперимента CMS на Большом адронном коллайдере. Данный центр является базовой установкой ОИЯИ и создает условия

физикам Института, стран-участниц, коллаборации RDMS-CMS для полномасштабного участия в обработке и анализе данных, поступающих с эксперимента CMS.

На базе Центрального информационно-вычислительного комплекса ОИЯИ развивается многофункциональный центр хранения, обработки и анализа данных, призванный обеспечить широкий спектр возможностей пользователям на основе входящих в него компонентов: грид-инфраструктур уровня Tier-1 и Tier-2 для поддержки экспериментов на LHC (ATLAS, ALICE, CMS, LHCb), FAIR (CBM, PANDA) и других масштабных экспериментов (NICA); вычислительного кластера общего назначения; инфраструктуры облачных вычислений; вычислительного кластера с гетерогенной архитектурой HybriLIT; учебно-исследовательской инфраструктуры для распределенных и параллельных вычислений.

В 2015 г. сотрудниками Лаборатории информационных технологий опубликовано 155 научных работ в реферируемых научных изданиях, представлено 30 докладов на международных и российских конференциях.

### **ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ОИЯИ**

В 2015 г. в лаборатории продолжены работы, связанные с развитием и обеспечением надежного функционирования сетевой и информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ. Ее основными элементами являются телекоммуникационные каналы связи, локальная вычислительная сеть

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

**Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ.** В 2015 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), LHCONE/ЦЕРН (10 Гбит/с), RUNNet (10 Гбит/с), RBnet (10 Гбит/с), eApena (10 Гбит/с). Пропускная способность резервного канала связи постоянно поддерживается на уровне 10 Гбит/с. Проработана возможность модернизации внешнего канала ОИЯИ–Москва для передачи данных на скорости 100 Гбит/с. Распределение входящего (превышающего 3 Тбайт) и исходящего трафика по подразделениям ОИЯИ в 2015 г. приведено в табл. 1. Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего назначения, Tier-1, Tier-2 и вычислительный комплекс, составил в 2015 г. 4,3 Пбайт (3,3 Пбайт в 2014 г.). Процентное распределение входящего трафика по категориям приведено в табл. 2.

**Таблица 1**

Подразделение	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт
ЛЯП	107,45	48,49
ЛФВЭ	74,46	66,31
Серверы общего доступа	60,29	11,11
ЛИТ	52,08	27,19
ЛНФ	42,98	57,24
ГРК	25,47	4,4
ЛЯР	23,61	4,12
ЛТФ	23,22	16,35
Управление	20,92	61,44
Узел удаленного доступа	19,65	5,09
Университет «Дубна»	12,12	8,38
VG Computers	11,9	1,64
ОАО «НПК Дедал»	10,98	4,46
МСЧ-9	9,84	1,02
ЛРБ	7,01	2,86
ООО «НПО Атом»	3,76	0,33

Создание центра Tier-1 в ОИЯИ потребовало высокоскоростной надежной сетевой инфраструктуры с выделенным резервируемым каналом в ЦЕРН (LHCOPN). Пропускная

способность LHCOPN между Tier-0–Tier-1 и между Tier-1–Tier-1 составляет 10 Гбит/с.

**Локальная вычислительная сеть ОИЯИ.** В 2015 г. были продолжены работы по развитию и совершенствованию сетевых компонентов ИТ-структуры ОИЯИ, призванные повысить эффективность работы сотрудников Института. 10-гигабитная сеть покрыла 80 % сетевого оборудования лабораторий ОИЯИ. В рамках поддержки пользовательской компьютерной среды произведены плановые работы по усовершенствованию mail, webmail, проху, e-lib и сервисов авторизации. Так, осуществлялся переход подразделений ОИЯИ на единую общеинститутскую почтовую службу user@jinp.ru, на площадках ОИЯИ начал функционировать авторизованный Wi-Fi, а также сервисы edugoat и VPN для работы удаленным образом за пределами сети Института.

ЛВС ОИЯИ содержит 7806 сетевых элементов и 12555 IP-адресов. На 2015 г. зарегистрировано 4129 пользователей сети, более 1500 пользователей сервиса mail.jinp.ru, 1480 пользователей электронных библиотек и 641 пользователь сервиса удаленного доступа.

**Многофункциональный центр хранения, обработки и анализа данных.** В 2015 г. продолжены работы по созданию многофункционального информационно-вычислительного комплекса в ОИЯИ. Основная задача комплекса — расширение набора вычислительных сервисов, представляемых пользователям.

Главными компонентами комплекса являются:

- автоматизированная система обработки данных эксперимента CMS на Большом адронном коллайдере уровня Tier-1;
- грид-система уровня Tier-2 для поддержки экспериментов на Большом адронном коллайдере (ATLAS, ALICE, CMS, LHCb), FAIR (PANDA) и других масштабных экспериментов и проектов в рамках всемирной грид-инфраструктуры;
- высокопроизводительная система вычислений (в том числе параллельных) вне рамок гетерогенных и грид-систем;
- гетерогенный вычислительный комплекс;
- облачная среда.

**Таблица 2**

Научно-образовательные сети	Файлообмен (p2p)	Веб-ресурсы	Социальные сети	Программное обеспечение	Мультимедиа
91,33 %	4,86 %	2,77 %	0,67 %	0,36 %	0,01 %

**Грид-среда ОИЯИ.** В 2015 г. запущен в эксплуатацию центр уровня Tier-1 для эксперимента CMS на Большом адронном коллайдере [1]. Он является одним из восьми центров такого уровня в мире. При его создании была разработана инженерная инфраструктура (система бесперебойного электропитания, климат-контроля и др.), высокоскоростная надежная сетевая инфраструктура с выделенным резервируемым каналом в ЦЕРН (LHCOPN), вычислительная система (2400 вычислительных ядер) и система хранения на базе дисковых массивов (2,4 Пбайт), а также роботизированной ленточной библиотеки большой емкости (5 Пбайт). Введенные в эксплуатацию системы обеспечивают 100%-ю надежность и доступность центра. Опыт, приобретенный в ЛИТ при создании центра Tier-1, будет использован при разработке и внедрении информационно-вычислительной среды хранения и обработки данных мегапроекта NICA и других масштабных проектов стран-участниц ОИЯИ. В 2015 г. на этом центре выполнено 1 362 474 задачи, а нормированное время ЦПУ составило 141 753 061 ч в единицах HEPSpec06. На рис. 1 представлен вклад мировых центров Tier-1 в обработку данных эксперимента CMS за последние месяцы 2015 г. Сайт ОИЯИ занимает одно из лидирующих мест в мире по производительности.

В 2015 г. продолжалась работа в рамках крупномасштабных грид-проектов: «Всемирный вычислительный грид для ЛHC» (WLCG, <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>), «Европейская грид-инфраструктура» (EGI-InSPIRE — Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe, <http://www.egi.eu/projects/egi->

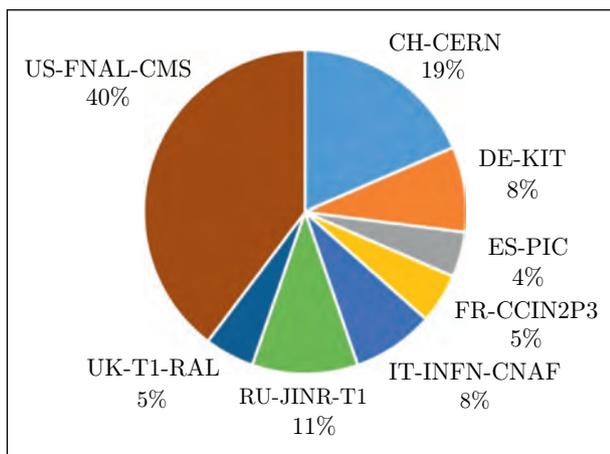


Рис. 1. Использование центров Tier-1 в эксперименте CMS

inspire/). Вычислительный кластер ОИЯИ как грид-сайт JINR-LCG2 глобальной грид-инфраструктуры поддерживает вычисления восьми виртуальных организаций (alice, atlas, biomed, cms, dteam, fusion, hone, lhcb), а также предоставляет возможность использования грид-ресурсов для экспериментов BES и PANDA. В настоящее время 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. Основными пользователями грид-ресурсов ОИЯИ являются виртуальные организации всех экспериментов на ЛHC. В 2015 г. на этом сайте было выполнено 4 666 405 задач, затраты процессорного времени при этом составили 171 418 826 ч в единицах HEPSpec06. На рис. 2 представлено использование грид-сайта JINR-LCG2 виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI.

За 2015 г. системы хранения данных грид-центра ОИЯИ, включающего в себя сайт 2-го уровня JINR-LCG2 и сайт 1-го уровня JINR-T1 (в терминологии глобальной инфраструктуры проекта WLCG) были востребованы в глобальной инфраструктуре WLCG следующим образом: объем данных, переданных из ОИЯИ по всем мировым сайтам WLCG (США, Франция, Швейцария, Канада и др.), по эксперименту CMS составил 3215 Тбайт и по эксперименту ATLAS — 308 Тбайт, а объем полученных ОИЯИ данных составил 3052 Тбайт по эксперименту CMS и 351 Тбайт — по эксперименту ATLAS.

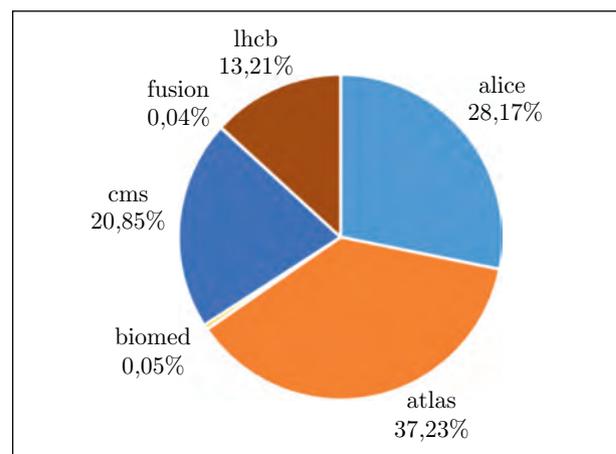


Рис. 2. Использование грид-сайта JINR-LCG2 виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI

На протяжении 2015 г. мощности систем хранения информации GRID-центра ОИЯИ активно использовали страны-участницы ОИЯИ и ассоциированные страны-члены ОИЯИ в рамках их участия в проектах ALICE, ATLAS и CMS. Данных эксперимента CMS было передано из ОИЯИ 815 Тбайт и записано в ОИЯИ 654 Тбайт (в том числе: Италия — 330 и 348 Тбайт соответственно, Германия — 408 и 286 Тбайт, Россия — 37 и 5 Тбайт, Украина — 23 и 3 Тбайт, Венгрия — 14 и 9 Тбайт). Данных эксперимента ATLAS было передано из ОИЯИ 72,5 Тбайт и записано в ОИЯИ 66 Тбайт (Германия — 24 и 28 Тбайт соответственно, Россия — 32 и 20 Тбайт, Италия — 13 и 14 Тбайт, Чехия — 0,5 и 2 Тбайт, Румыния — 1 и 1 Тбайт, Словакия — 1,5 и ~0,5 Тбайт, Польша — 0,5 и 0,5 Тбайт, а также были обмены данными с сайтами Армении и ЮАР). Данных эксперимента ALICE было передано из ОИЯИ более 300 Тбайт и записано в ОИЯИ 2 Тбайт (передано по 2 Тбайт в Италию и Румынию, а также были обмены данными с сайтами Германии, Словакии, Украины, Чехии и ЮАР).

Для надежного функционирования всего вычислительного комплекса необходимо в ре-

жиме реального времени отслеживать состояние всех узлов — от системы энергообеспечения до роботизированной ленточной библиотеки. Введена в эксплуатацию новая система мониторинга вычислительного комплекса ОИЯИ, и создан центр контроля и управления работой комплекса. На сегодняшний день мониторируется 690 элементов вычислительного комплекса и проводится 3497 проверок в режиме реального времени. Мониторинг позволяет контролировать функционирование системы, визуализировать состояние вычислительного комплекса и посылать оповещение о сбоях в виде сообщения по электронной почте, SMS и т. п. [2]. На рис. 3 представлен один из экранов системы мониторинга, отражающий функционирование элементов вычислительного кластера.

В рамках работ по поддержке и развитию сервисов платформы PanDA проводились исследования по использованию сетевых метрик при принятии решений (задача под названием динамические облака), обновлены сервисы доставки сетевых метрик в информационную систему PanDA. Осуществлен перенос обработки данных эксперимента COMPASS на платформу PanDA. Проведены, совместно с Ниже-

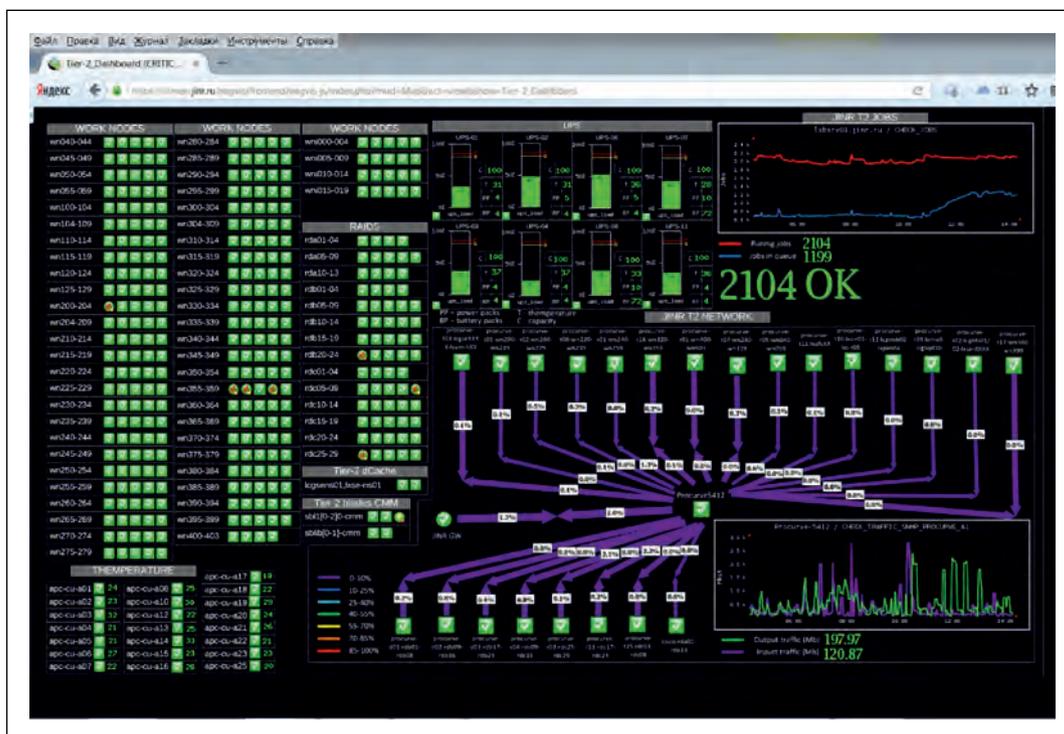


Рис. 3. Экран системы мониторинга компонента кластера, отображающий в режиме реального времени состояние и обеспечивающий проверку вычислительных серверов (WN), дисковых массивов (RD), охлаждающих панелей (APC), коммутаторов и маршрутизаторов и загрузку сети вычислительного комплекса, загрузку источников бесперебойного питания (UPS), число выполняемых на комплексе задач (2104) и ждущих очереди на выполнение (1199)

городским университетом, работы по установке сервера PanDA в ОИЯИ и запуску через него задач на кластер Нижегородского университета [3].

**Высокопроизводительная система вычислений.** Многофункциональный информационно-вычислительный комплекс (МИВК) в ЛИТ обеспечивает проведение пользователями вычислений, в том числе параллельных, вне рамок грид-среды. Это необходимо как экспериментам NOVA, PANDA, BES, NICA/MPD и др., так и локальным пользователям из лабораторий ОИЯИ. Все вычислительные мощности доступны и пользователям ОИЯИ, и пользователям грид-среды через единую систему пакетной обработки заданий. В 2015 г. на вычислительном кластере (без учета пользователей грид-среды) зарегистрировано 903 пользователя. На рис. 4 приведено распределение по времени задач, выполненных на вычислительном кластере подразделениями Института и группами пользователей. Основным пользователем этих ресурсов является NICA/MPD (64,6% астрономического и 46,9% процессорного времени).

Системы хранения и доступа к данным dCache и XROOTD обеспечивают работу с данными как для локальных пользователей ОИЯИ, так и для внешних пользователей. Поддерживаются 2 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 досту-

па к данным XROOTD поддерживают работу с данными международных коллабораций ALICE и PANDA. Все системы хранения построены с использованием аппаратного механизма защиты данных RAID6.

**Вычислительный кластер с гетерогенной архитектурой HybriLIT.** В 2015 г. активно развивалась гетерогенная компонента МИВК как в плане увеличения вычислительной мощности, так и в плане развития программно-информационной среды и внедрения новых сервисов для разработки, отладки и профилирования параллельных приложений. В частности, производительность кластера в 2015 г. выросла в 1,5 раза за счет включения в его состав двух вычислительных узлов с графическими ускорителями последнего поколения NVIDIA K80. Текущая конфигурация кластера, представленная на рис. 5, включает в себя два узла с двумя графическими ускорителями NVIDIA Tesla K80, четыре узла с тремя GPU 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. Каждый вычислительный узел имеет два 12-ядерных процессора Intel Xeon E5-2695v2, суммарно кластер содержит 216 CPU-ядер, 57 216 GPU-ядер, 182 PHI-ядра; 896 GB RAM; 57,6 TB HDD, а его полная производительность для операций с одинарной точностью составляет 111 и 40 Тфлопс для вычислений с двойной точностью. В течение 2015 г. количество пользователей кластера возросло в два раза

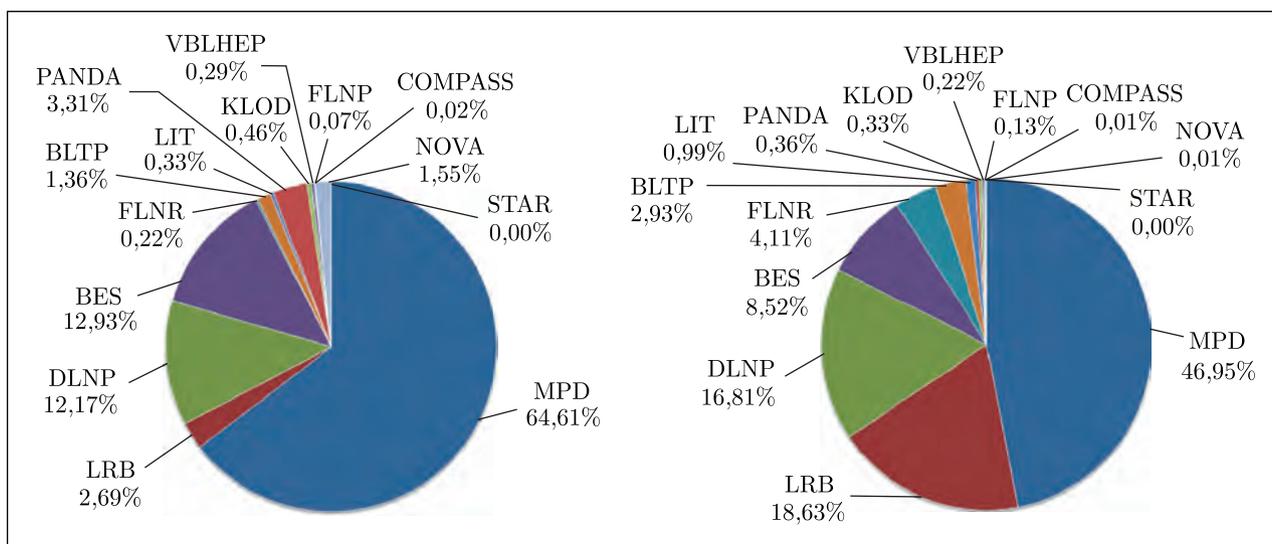


Рис. 4. Статистика использования астрономического (слева) и процессорного (справа) времени вычислительного кластера подразделениями и экспериментами ОИЯИ без учета пользователей грид-среды

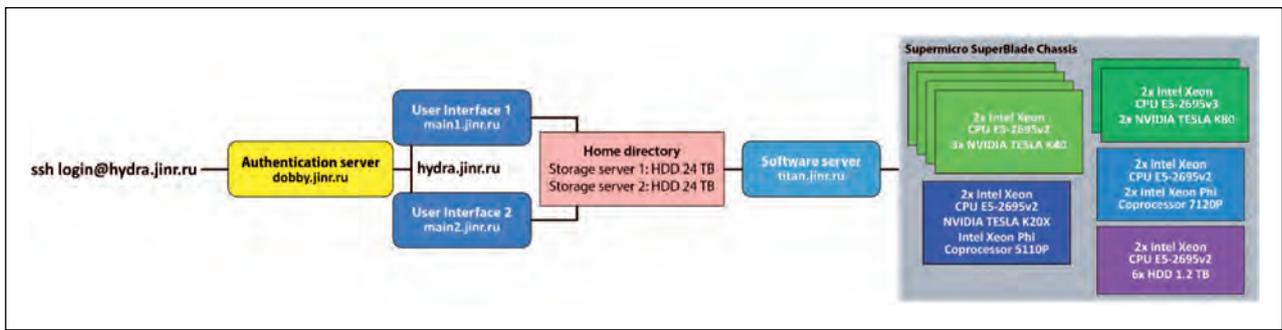


Рис. 5. Структура гетерогенного вычислительного кластера HUBRIKIT

и составило 120 исследователей из ОИЯИ, стран-участниц и университетов России, использующих кластер для проведения расчетов с применением ускорителей вычислений, для создания собственного программного обеспечения, а также для проведения ресурсоемких расчетов с уже адаптированными на гибридные архитектуры пакетами прикладных программ и математических библиотек.

Кластер HUBRIKIT используется не только для проведения параллельных расчетов на новых вычислительных архитектурах, но и как полигон для обучения студентов, аспирантов и молодых ученых технологиям параллельного программирования. В течение 2015 г. на базе кластера было проведено 27 учебных курсов и лекций, в которых приняли участие более 250 человек из ОИЯИ и стран-участниц. Также учебные курсы проводились в рамках конференций и школ, организованных ЛИТ ОИЯИ (ММСР'2015, NEC'2015, AIS GRID'2015) по программам международного сотрудничества в Софийском университете, Монгольском государственном университете. В регулярно проводимых группой HUBRIKIT учебных курсах для сотрудников ОИЯИ, студентов и аспирантов университета «Дубна» были организованы занятия по C/C++, ROOT, PROOF, технологиям параллельного программирования CUDA, OpenMP, OpenCL, MPI, а также внедренному в информационную среду кластера сервису GitLab, предназначенному для коллективной разработки программного обеспечения.

**Облачная среда.** В 2015 г. продолжено развитие и наращивание ресурсов облачной инфраструктуры ОИЯИ (<http://cloud.jinr.ru>), которая построена на программной платформе OpenNebula. Для уменьшения времени простоя сервиса и увеличения надежности его работы облако ОИЯИ построено в конфи-

гурации высокой надежности и доступности (рис. 6).

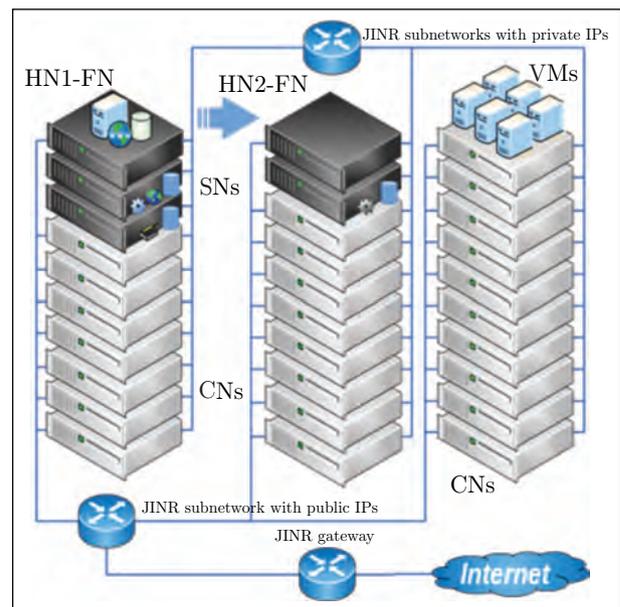


Рис. 6. Схема облачной инфраструктуры ОИЯИ в конфигурации высокой надежности и доступности: HN1-FN, HN2-FN — физические серверы с компонентами облачной головной машины (frontend, FN), CNs — облачные рабочие узлы, на которых непосредственно размещаются виртуальные машины (VMs), SNs — узлы хранения данных

На сегодняшний день облако состоит из 40 серверов, содержит 200 вычислительных ядер, 400 Гбайт оперативной памяти и 16 Тбайт дискового пространства. Облачные ресурсы ОИЯИ [4] используются по трем основным направлениям:

- для учебных, исследовательских и тестовых задач в различных проектах;
- для размещения сервисов с высокой доступностью и надежностью;
- в качестве счетных ресурсов, в том числе как расширение вычислительных возможностей грид-инфраструктур.

В облачной инфраструктуре развернуты следующие сервисы и полигоны: полигон на базе промежуточного программного обеспечения (ППО) грид ЕМІ (используется для обучения, тестирования, разработки и решения исследовательских задач в рамках участия ОИЯИ в различных проектах, связанных с применением этого ППО, включая проект WLCG); полигон PanDA (для развития продукта PanDA и его использования для решения задач экспериментов ATLAS и COMPASS); полигон на базе ППО DIRAC (используется для разработки средств мониторинга распределенной вычислительной инфраструктуры эксперимента BES-III, а также как один из ее вычислительных ресурсов); набор контейнеров для пользователей-участников эксперимента NOvA (моделирование и анализ); полигон для изучения и оценки ППО для построения вычислительной инфраструктуры экспериментов на ускорителе NICA; полигон на базе системы хранения данных EOS для выполнения обязательств в рамках участия в проекте по исследованию гетерогенных киберинфраструктур, разработки и создания прототипа компьютерной федерации на основе высокоскоростных вычислений, облачных вычислений и суперкомпьютеров для хранения, обработки и анализа больших данных; сервисы вычислительного комплекса HUBRIЛIT (Indico — сервис для организации научных мероприятий, FreeIPA — централизованная система по управлению идентификацией пользователей, задания политик доступа и аудита, Git — локальный Git-репозиторий на базе популярной системы контроля версий), Helpdesk (система поддержки пользователей ИТ-сервисов, предоставляемых ЛИТ); полигон на базе ПО BOINC для оценки возможности использования добровольных вычислений в решении задач ученых ОИЯИ; веб-сервис HerWeb, предоставляющий возможность использовать различные инструменты для моделирования Монте-Карло в области физики высоких энергий; тестовые экземпляры сервера документов ОИЯИ и сервиса управления проектами для отладки перехода на новые версии и тестирование нового функционала; контейнер для разработки веб-сайтов, включая новый веб-портал ОИЯИ; GitLab — локальная инсталляция сервиса GitLab для всех пользователей ОИЯИ; полигон на базе ПО Nadoop; набор виртуальных машин и контейнеров пользователей для их собственных нужд; контейнеры для оценки существующих систем мониторинга и разра-

ботки на их базе новых систем мониторинга сервисов.

Для объединения ресурсов в рамках сотрудничества по совместным проектам выполнена интеграция облака ОИЯИ с облачной инфраструктурой Российского экономического университета им. Г.В.Плеханова, Института теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова (Киев) и Института физики (Баку). Ведутся работы по интеграции с европейской облачной инфраструктурой EGI Federated Cloud.

**Информационная и программная поддержка.** В рамках проекта NICA в ЛИТ активно развивается информационная система управления проектом (ИСУП) NICA EVM. Создан гибкий инструмент расширения существующей системы ИСУП ADB2 для нужд проекта NICA, созданной в процессе работ по системе ART EVM. В этой системе реализованы следующие функциональные возможности: управление иерархической структурой проекта (WBS), планирование и перепланирование работ по проекту, учет различных версий планов проекта (baselines), отслеживание хода выполнения проекта по показателям фактических платежей (AC — actual cost) и освоенного объема (EV — earned value или процент выполнения работы), регулярное уведомление пользователей по электронной почте (для своевременного отчета о ходе выполнения работ), различные варианты отчетности (графики) по методике EVM (earned value management), построение финансовой отчетности по проекту с учетом «годового окна» как ключевой особенности структуры бюджета ОИЯИ и графиков платежей по работам проекта, жесткого разграничения прав доступа пользователей, WEB-интерфейс. В 2015 г. были продолжены работы по расширению функциональных возможностей блока оперативного управления путем интеграции ADB2 с MS Project Prof, а также добавлена возможность выбора альтернативных вариантов профилей плана хода выполнения работ.

Второе направление поддержки проекта NICA в ЛИТ связано с динамическим моделированием всех процессов, включенных в хранение, передачу и анализ данных для компьютерной инфраструктуры проекта. Разработана программа SyMSim (Synthesis of Monitoring and SIMulation) для моделирования грид-облачной среды. Оригинальность подхода состоит в объединении процесса моделирования информационно-вычислительной среды с данными реального мониторинга грид-облач-

ных сред (на примере центра Tier-1 ОИЯИ) в рамках одной программы. Результаты моделирования компьютерной системы для экспериментов на NISA, состоящей из центров Tier-0 и Tier-1, позволяют сделать выводы по оптимальному соотношению числа процессоров и систем хранения для обработки данных и предоставляют решения по моделированию проблем и последующей разработке хранилищ данных [5]. В рамках проекта создана новая система моделирования грид- и облачных сервисов, объединяющая в себе мониторинг, анализ его результатов и собственно моделирование. Объектами моделирования являются вычислительные установки, предназначенные для обработки информации объемом до десятков петабайт в год [6].

Основные работы в рамках развития единой информационной платформы IC 8.3 УПП были направлены на включение в систему хозяйственных подразделений ОИЯИ. В 2015 г. в IC 8.3 УПП были добавлены следующие подразделения: отдел главного энергетика (ОГЭ), автохозяйство (АТХ), ремонтно-строительное управление (PCY), управление социальной инфраструктуры, управление гостинично-ресторанного комплекса (УГРК), пансионат «Дубна». Сразу был запущен первичный бухгалтерский учет, табельный и кадровый учет. Настроен автоматический расчет себестоимости выпуска в PCY, АТХ и ОГЭ. В течение 2015 г. был централизован расчет заработной платы, что в свою очередь позволило повысить скорость формирования отчетности в фонды (ПФР, ФСС). В УГРК запущен модуль по учету жилищного фонда института. В управлении персонала был реализован модуль по учету карт специальной оценки условий труда (СОУТ), сформирована единая электронная база данных карт. Модернизованы все кадровые документы и документы отдела охраны труда и заработной платы для учета результатов карт СОУТ.

В 2015 г. разработана и внедрена в эксплуатацию подсистема электронного согласования приказов по основной деятельности в составе системы «База документов ОИЯИ». Кроме того, разработана и запущена в пробную эксплуатацию 1-я очередь полноценной системы электронного документооборота «СЭД Дубна». В разработке «СЭД Дубна» применены технологии и инструментальные средства, ранее разработанные в сотрудничестве с ЦЕРН и успешно использовавшиеся при создании систем автомати-

зации административно-управленческой деятельности в ЦЕРН и ОИЯИ. Эти средства позволяют создавать в короткие сроки сложные и гибкие веб-приложения с дружественным интерфейсом пользователя. В системе запущен документ «Заявка на закупку продукции».

В 2015 г. продолжено сопровождение и развитие программного обеспечения по автоматизации информационно-библиотечной деятельности НТБ ОИЯИ — наполнение и сопровождение электронных коллекций бюллетеней НТБ ОИЯИ, сопровождение электронных каталогов, поддержка on-line сервиса «Электронная рассылка еженедельных информационных бюллетеней НТБ». Осуществлялось сопровождение и развитие репозитория открытого доступа JINR Document Server: наполнение и верификация коллекций, настройка выходных форматов, настройка и тестирование модуля обработки нормативных файлов.

В течение 2015 г. продолжались работы по актуализации и модернизации программной среды, баз данных и содержимого информационных сайтов ЛИТ и ОИЯИ: [lit.jinr.ru](http://lit.jinr.ru), [www.jinr.ru](http://www.jinr.ru), [wwwinfo.jinr.ru](http://wwwinfo.jinr.ru), [faxe.jinr.ru](http://faxe.jinr.ru), [ptp.jinr.ru](http://ptp.jinr.ru), [pkp.jinr.ru](http://pkp.jinr.ru). Совместно с НТО АСУ ОИЯИ продолжены работы по модернизации программ для административно-хозяйственного профиля. В рамках темы 05-8-1037-2001/2019 велись работы по актуализации базы данных на 2015 г. для «Системы интерактивного формирования проблемно-тематического плана научной организации (на примере ОИЯИ)»: сайт [ptp.jinr.ru](http://ptp.jinr.ru). В 2015 г. проводились работы по сопровождению и модернизации веб-портала журналов «Физика элементарных частиц и атомного ядра» (ЭЧАЯ) и «Письма в ЭЧАЯ»: <http://perap.jinr.ru/>. Традиционно велись 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 — ISINN, ЛЯР им. Г. Н. Флерова — EXON-2016, ЛРБ — MPGRRE-2015 и др.).

С мая 2015 г. ведутся работы (совместно с отделом международных связей ОИЯИ) по созданию и запуску в эксплуатацию специализированной информационной системы User Office, обеспечивающей on-line поддержку выполнения процесса приема визитеров в ОИЯИ.

## 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 экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. Ниже приведена краткая информация о некоторых из полученных результатов.

Для экспериментов NICA/MPD и CBM адаптирована программа для вычислений геометрических характеристик ядро-ядерных взаимодействий, широко применяемая на RHIC и LHC. Для задания профиль-функции нуклон-нуклонных соударений используется параметризация, ранее предложенная авторами. Для определения ядерных параметров применяется подход, широко известный в физике низких и промежуточных энергий. Программа расширена возможностью учета грибовского неупругого экранирования [7].

Разработан и протестирован новый алгоритм реконструкции трек-сегментов в катодно-стриповых камерах эксперимента CMS. Как видно из рис. 7, на данных Монте-Карло с тераэлектронвольтными мюонами эффективность реконструкции трек-сегментов выше на 4–7% для предложенного алгоритма и практически не уменьшается с ростом псевдобыстроты по сравнению со стандартным алгоритмом [8].

Получены оценки пространственного разрешения в катодно-стриповых камерах CMS

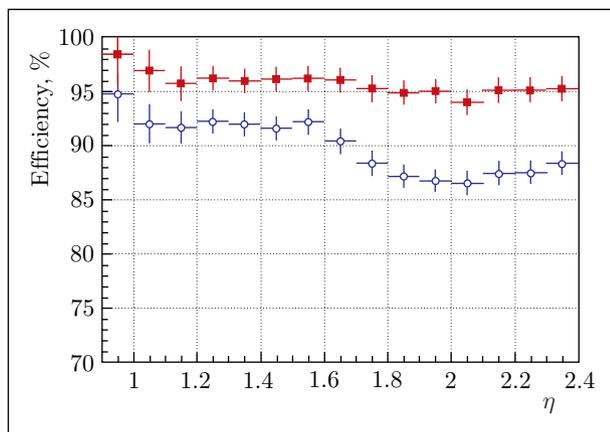


Рис. 7. Эффективность реконструкции трек-сегментов в катодно-стриповых камерах в зависимости от псевдобыстроты для моделированных тераэлектронвольтных мюонов: результаты реконструкции со стандартным алгоритмом — синий цвет, с новым алгоритмом — красный цвет

на экспериментальных данных с коллайдера LHC 2015 г., что согласуется с результатами 2012 г. При этом существенно улучшилось разрешение (с 64 до 50 мкм) в нижней части камеры ME1/1 после разделения спаренных сигналов со стрипов. Проведенные расчеты на данных Монте-Карло для будущего коллайдера HL-LHC показывают, что триггерные загрузки в ME1/1-камерах от адронного проникающего излучения возрастут в 30 раз по сравнению с экспериментальными данными 2012 г., что потребует дополнительных технических решений, например, увеличения толщины абсорбера калориметра [8].

Для эксперимента VM@N разработан и реализован алгоритм реконструкции траекторий частиц в дрейфовых камерах, в результате чего были устранены «шумящие» каналы. Также произведено геометрическое выравнивание камер (на программном уровне), получены оценки пространственного разрешения и эффективности работы дрейфовых камер, а также импульса частиц пучка нуклофона.

Предложен алгоритм реконструкции треков заряженных частиц на основе фильтра Калмана. Данный алгоритм применяется для решения одной из ключевых задач эксперимента CBM (Condensed Baryon Matter) — распознавания траекторий заряженных частиц и определения их параметров. При этом, так как в эксперименте CBM планируется полная реконструкция сигнальных событий в реальном времени, разрабатываемые алгоритмы должны быть быстрыми, максимально использующими возможности современных многоядерных процессоров и GPU-архитектур. Расчеты проведены на высокопроизводительном сервере с двумя процессорами Intel Xeon X5660 и видеокартой NVIDIA GTX 480 [9].

Модель микроскопического оптического потенциала (ОП) применена для анализа упругого рассеяния  $^{10,11}\text{Be}$  протонами и ядрами и анализа сечений неупругого рассеяния  $\pi$ -мезонов ядрами  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{208}\text{Pb}$  при энергии  $T_{\text{lab}} = 291$  МэВ. Распределения плотности ядер  $^{10,11}\text{Be}$ , полученные в модели генераторных координат (GCM) и квантовым методом Монте-Карло (QMC), использованы для расчета ОП и затем дифференциальных сечений упругого рассеяния этих ядер на протонах и

ядрах  $^{12}\text{C}$ . Для анализа сечений неупругого рассеяния  $\pi$ -мезонов использовались параметры  $\pi N$ -амплитуды в ядерной среде, полученные ранее из анализа данных упругого рассеяния на тех же ядрах. Определены параметры глубины реальной и мнимой частей ОП с учетом известной зависимости объемных интегралов ОП от энергии. Полученные потенциалы можно использовать в дальнейших расчетах сечений реакций с участием этих ядер [10].

Предложен новый байесовский анализ оценки вероятностей реалистичных моделей уравнения состояния холодной плотной ядерной материи на основе независимых измерений массы и радиусов нейтронных звезд. Один из ключевых вопросов анализа — является ли деконфайнмент в ядрах компактных звезд переходом типа кроссовер или переходом первого рода. Последнее актуально для возможного существования критической конечной точки на фазовой диаграмме КХД, что находится в сфере интересов ряда существующих и будущих экспериментов по соударению тяжелых ионов, таких как MPD на NICA и CBM на FAIR. В связи с этим интересным становится вопрос о существовании массовых близнецов (звезд третьего семейства) — звезд с одинаковой массой, но различной структуры. На основе селективных наблюдательных данных по пульсарам была сделана вероятностная оценка гибридных моделей уравнения состояния холодной плотной материи, основанных на адронных моделях типа APR (с эффектами и без эффектов исключенного объема) и на модели мешка для кварковой материи. В анализе использовались наблюдательные данные по массе одного из массивных пульсаров PSR J0348+0432 и по радиусу пульсара PSR J0437-4715. Расчеты показывают, что модели уравнения состояния, предполагающие существование сверхмассивных близнецов, имеют наиболее высокую вероятностную меру [11].

## НАУЧНО-ПРИКЛАДНЫЕ РАБОТЫ

В ЛИТ в сотрудничестве с ЛФВЭ разработаны алгоритмы численного моделирования эволюции процесса теплопроводности с периодическим по времени источником, который был реализован на языке OpenCL для проведения расчетов на графических процессорных устройствах. Рассмотрена модель многослой-

Теоретический подход, ранее применявшийся для расчета двукратной фотоионизации двухъядерной молекулы азота  $\text{N}_2$ , распространен на процессы фотоионизации трехцентральной молекулы  $\text{CO}_2$ , в которых образуется диссоциативный дикатион  $\text{CO}_{22}^+$ . Связанные состояния электронов описываются в рамках орбиталей Дайсона, а испущенные электроны моделируются параметризованной коррелированной трехцентральной функцией континуума. Изучаются дифференциальные сечения рассеяния при детектировании испущенных электронов на совпадение. Ориентация межъядерной оси молекулы  $\text{CO}_2$  предполагается произвольной. Сравнение полученных результатов с гауссовой параметризационной моделью демонстрирует сходства и различия между одноатомными мишенями и молекулой  $\text{CO}_2$  [12].

Нерелятивистская квантовая механика рассматривает движение заряженной частицы со спином в поле слабой монохроматической электромагнитной волны в рамках дипольного приближения и предсказывает прецессию спина частицы. Однако с ростом интенсивности электромагнитного излучения релятивистские эффекты вступают в силу и нарушают адиабатический характер динамики спина. Для их количественного учета была сформулирована модель спин-лазерного взаимодействия, позволяющая рассчитать процессы вне дипольного приближения. Эволюция состояний частицы со спином  $-1/2$  исследовалась в квазиклассическом подходе, основанном на уравнении Паули, модифицированном релятивистскими поправками, обусловленными учетом запаздывания, влиянием магнитной составляющей силы Лоренца и прецессией Томаса. При расчете переходов в поле эллиптически поляризованного лазера модифицированное уравнение Паули приводилось к уравнению Риккати, численный анализ которого выявил резонансный характер зависимости вероятности переворота спина от интенсивности, поляризации света и гиромагнитного отношения заряженной частицы [13].

ного цилиндрического устройства с нетривиальной расчетной областью и нелинейными термодинамическими свойствами материалов при криогенных температурах. С помощью данной модели описывается так называемая криогенная ячейка, предназначенная для импульсной подачи рабочих газов в камеру

источника многозарядных ионов. Разработанные алгоритмы дают возможность дальнейшей оптимизации проектирования криогенной ячейки [14].

Сотрудниками ЛИТ и ЛНФ проведено исследование полидисперсной популяции везикул димиристоилфосфатидилхолина в водных растворах сахарозы методами малоуглового рассеяния нейтронов и малоуглового рассеяния рентгеновского синхротронного излучения. Расчеты на основе единого подхода, определяемого методом разделенных формфакторов, показали, что увеличение концентрации сахарозы существенно влияет на структуру везикулярной системы [15].

В ЛИТ продолжают прикладные исследования физических процессов в пористых материалах, таких как проникновение и перенос влаги, приводящих к химическим и физическим повреждениям материалов. Предложена новая система уравнений, в которую включены три физических процесса: переносы теп-

## МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В работе, выполненной сотрудниками ЛИТ и Национального института исследования и развития технологии молекулярных изотопов (Клуж-Напока, Румыния), предложен подход к эффективной обработке спутниковых изображений, включающий два этапа. Первый этап заключается в распределении быстро возрастающего объема спутниковых данных, полученных через грид-инфраструктуру. Второй этап включает в себя ускорение решения отдельных задач, относящихся к обработке изображений с помощью внедрения кодов, способствующих интенсивному использованию пространственно-временного параллелизма. Примером такого кода является обработка изображений с помощью итерационного фильтра Перона–Малик в рамках специального применения архитектуры аппаратного обеспечения ППВМ (FPGA) [18].

В рамках сотрудничества между группой по гетерогенным вычислениям HуbriLIT и

## СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

Двухдневное рабочее совещание «Управление данными и анализ вызовов в мегасайенс экспериментах» проходило 29–30 января в НИЦ «Курчатовский институт» и Лабора-

ла, жидкости и насыщенного пара в пористых материалах. Эти уравнения решаются схемой расщепления. Результаты численных экспериментов находятся в хорошем согласии с данными наблюдений [16].

В ЛИТ и ФКУ «Ространсmodernизация» разработана методика прогнозирования объемов пассажирских перевозок в московском метрополитене с помощью искусственных нейронных сетей. Проведен анализ и отбор тех факторов, которые оказывают основное воздействие на пассажирский трафик в метрополитене. На данных, отвечающих суточным объемам пассажирских перевозок в будние дни, продемонстрирована принципиальная возможность краткосрочного прогнозирования с приемлемой точностью. Показано, что применение вейвлет-фильтрации к реализованным значениям суточных объемов пассажирских перевозок позволяет существенно повысить точность прогноза и увеличить горизонт прогнозирования [17].

группой по теории многочастичных бозонных систем Центра квантовой динамики Гейдельбергского университета продолжена разработка программного обеспечения для исследования динамических свойств квантовых систем, в том числе реализованных на основе сверххолодных атомов и молекул, находящихся во внешних магнитооптических потенциалах (ловушках). В 2015 г. был представлен программный пакет MCTDHB-Lab (<http://qdlab.org>), основанный на решении нестационарного уравнения Шредингера методом MCTDHB (The Multiconfigurational Time-Dependent Hartree for Bosons). Этот пакет является кроссплатформенным (работает на операционных системах Windows, Linux, OS X), свободно распространяемым, с удобным графическим интерфейсом (см. рис. 5). На основе этого пакета были проведены систематические исследования динамических свойств многочастичных квантовых систем [19].

рии информационных технологий ОИЯИ. Основной темой этого совещания стало обсуждение проблемы больших данных в мегапроектах. В совещании приняли участие известные

специалисты из университетов России, США, ЦЕРН, европейских центров и Тайваня. Большое внимание было уделено моделированию облачных инфраструктур, обсуждению дальнейшего развития современных компьютерных инфраструктур для решения задач не только обработки данных ЛНС или других мегапроектов, но и задач в области биологии, химии, климата, социальных проблем. На совещании также были представлены доклады о развитии центров Tier-1 в Тайване, «Курчатовском институте» и ЛИТ ОИЯИ. Завершилось совещание общей дискуссией по совершенствованию глобальной компьютерной инфраструктуры, используемой в существующих и будущих мегапроектах.

26–27 мая в ЛИТ ОИЯИ был проведен научно-практический форум «Распределенные информационно-вычислительные системы и обработка данных в XXI веке» (РИВС-XXI), организаторами которого явились ЛИТ ОИЯИ и НИИЯФ МГУ. Форум был посвящен вопросам современных тенденций в области проектирования, создания и практики применения современных и перспективных распределенных информационно-вычислительных систем и технологиям обработки на их основе больших объемов данных. На форуме были представлены доклады ведущих специалистов в области распределенных вычислительных систем, включающие суперкомпьютерные и грид-технологии. В форуме приняли участие более 50 представителей ОИЯИ, НИИЯФ МГУ, НИЦ «Курчатовский институт», университета «Дубна», НИУ ИТМО, ООО «Ниагара Компьютерс» и др. По окончании форума был проведен круглый стол «Будущее распределенных технологий обработки больших данных».

Традиционное двухдневное рабочее совещание по компьютерной алгебре проходило в ЛИТ ОИЯИ 26–27 мая. В совещании приняли участие более 30 ученых из университетов и научных центров Бухареста, Минска, Тбилиси, Москвы, Санкт-Петербурга, Ростова-на-Дону, Саратова и Дубны. В нем в 28 докладах был представлен ряд новых многообещающих результатов по развитию алгоритмов исследования и решения систем алгебраических и дифференциальных уравнений, по символично-численному моделированию квантово-механических систем, по вычислению многопетлевых фейнмановских интегралов методами компьютерной алгебры, а также по различным приложениям компьютерной алгебры в физике и математике.

С 13 по 17 июля в Высоких Татрах (Словакия) проходила очередная, восьмая международная конференция «Математическое моделирование и вычислительная физика» (ММСР'2015). Конференция была посвящена 60-летию со дня образования Объединенного института ядерных исследований. Соорганизаторами этой конференции выступили ЛИТ ОИЯИ, IFIN-HH (Бухарест, Румыния), Технический университет (Кошице, Словакия), Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук (Кошице, Словакия), Университет им. П. Й. Шафарика (Кошице, Словакия) и Союз словацких физиков. Научная тематика конференции охватила широкий круг вопросов, включающих в себя математические методы и программное обеспечение для моделирования сложных физических и технологических систем, вычислительной химии, биологии и биофизики; методы, программные и компьютерные комплексы для обработки экспериментальных данных; методы, алгоритмы и программное обеспечение для компьютерной алгебры и квантового компьютинга; распределенные вычисления и Big Data; параллельные и гибридные вычисления для систем с экстремально параллелизмом. В работе конференции приняли участие более 90 ученых и специалистов из Белоруссии, Болгарии, Германии, Канады, России, Румынии, Словакии, Украины и др. и большого числа российских научных центров и университетов, среди которых НИЦ «Курчатовский институт», ИМПБ РАН, ИТПМ СБ РАН, Санкт-Петербургский ГУ, Новосибирский ГУ, РУДН и др. Всего же на конференции было заслушано 17 приглашенных и 62 устных доклада. Среди молодых ученых и студентов, принявших участие в работе конференции, большой интерес вызвал обучающий курс по технологиям параллельного программирования CUDA и OpenCL, проведенный на базе гетерогенного вычислительного кластера HybriLIT. Издание трудов конференции завершено, 58 работ были приняты к печати в журнале EPJ Web of Conference. 2016. V. 108 (под редакцией Г. Адама, Я. Буша, М. Гнатича).

С 27 по 30 августа в ЛИТ проходило рабочее совещание «Численное моделирование сложных систем». В его работе приняли участие 22 ученых из ОИЯИ, России, Словакии, Китая и Тайваня. Участники совещания заслушали 16 докладов по численным методам, алгоритмам и инструментам моделирования сложных физических явлений и технических систем. В докладах были представлены результаты исследований, полученные при моде-

лировании биофизических и астрофизических систем, процессов стохастической динамики, оптики и ускорительной техники.

С 28 сентября по 2 октября в Республике Черногории (г. Будва) проходил XXV Международный симпозиум ОИЯИ по ядерной электронике и компьютерингу («Nuclear Electronics and Computing» — NEC'2015). Этот симпозиум является традиционным мероприятием ОИЯИ с 1963 г., в восьмой раз организаторами симпозиума были ОИЯИ и ЦЕРН. Научная программа симпозиума охватывала широкий круг проблем, в том числе детекторы и ядерная электроника; триггеринг, сбор данных, системы управления; распределенный, грид- и облачный компьютеринг; компьютеринг для крупномасштабных ускорительных установок (LHC, FAIR, NICA и т. д.); расчеты на гибридных вычислительных платформах (CPU, GPU, coprocessors). В работе симпозиума приняли участие 120 ведущих специалистов в области современных компьютерных и сетевых технологий, распределенного компьютеринга и ядерной электроники из 15 стран.

В рамках симпозиума состоялись рабочее совещание, круглый стол и международная студенческая школа по современным информационным технологиям, в которой приняли участие 40 студентов из ведущих университетов России.

При поддержке Объединенного института ядерных исследований, Европейской организации ядерных исследований и Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» со 2 по 6 ноября в ОИЯИ прошла шестая школа по информационным технологиям «Грид и административно-управленческие системы». Она была посвящена вопросам управления сложными научными комплексами и информационными системами на примере разрабатываемых технологий в ОИЯИ и ЦЕРН. В школе приняли участие более 60 студентов из МГУ, МИФИ, СПбГУ, университета «Дубна», РЭУ им. Г. В. Плеханова и ТвГУ. В рамках школы на базе кластера HybriLIT был проведен учебный курс по технологиям параллельного программирования на гибридных архитектурах.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Астахов Н. С. и др. // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7, № 3.
2. Kashunin I. et al. // ROLCG 2015 Conf. Cluj-Napoca. [http://www.itim-cj.ro/rolcg/contributions/s7\\_1.pdf](http://www.itim-cj.ro/rolcg/contributions/s7_1.pdf)
3. Петросян А. Ш. // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7, № 6.
4. Kutovskiy N. et al. // Procedia Comp. Sci. 2015. V. 66. P. 574–583.
5. Кореньков В. В. и др. // Системы и средства информатики. 2015. Т. 25, № 1. С. 3–19.
6. Korenkov V. et al. // Procedia Comp. Sci. 2015. V. 66. P. 533–539.
7. Галоян А. С., Ужинский В. В. // Письма в ЭЧАЯ. 2015. Т. 12, № 1. С. 231–236.
8. Voytishin N., Palichik V. // Proc. of MMCP2015. 2015 (in press); 2015 RDMS CMS Conference. 2015; Golutvoin I. et al. // EJP (to be published).
9. Ablyazimov T. O. et al. // Part. Nucl., Lett. 2015. V. 12, № 3. P. 423–427.
10. Zemlyanaya E. V. et al. // Phys. Rev. C. 2015. V. 91. P. 034606; Lukyanov V. K. et al. // Intern. J. Mod. Phys. E. 2015. V. 24. P. 1550035; Лукьянов В. К., Земляная Е. В., Лукьянов К. В. // ЯФ. 2015. Т. 78, № 1. С. 147–155.
11. Айриян А. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2015. Т. 46, № 5. С. 854–857.
12. Alwan O. et al. // J. Phys. B. 2015. V. 48. P. 185203–1–7.
13. Хведелидзе А. М., Рогожин И. А. // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 7. С. 118–125.
14. Ayrian A. et al. // Appl. Therm. Eng. 2016. V. 94. P. 151–158.
15. Киселев М. А. и др. // Кристаллография. 2015. Т. 60, № 1. С. 144–149.
16. Амирханов И. В. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2015. Т. 12, № 3(194). С. 584–589.
17. Иванов В. В., Осетров Е. С. // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». 2016. Т. 5, № 1. С. 65–74.
18. Белеан Б. и др. // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т. 7, № 3. С. 399–406.
19. Klaiman S. et al. // High Performance Computing in Science and Engineering'14: Transactions of the High Performance Computing Center / Ed. by W. E. Nagel, D. H. Kröner, M. M. Resch. Heidelberg: Springer, 2015. <http://qdlab.org>.