



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2019 г. Лабораторией информационных технологий (ЛИТ) 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 сотрудники ЛИТ принимали участие в исследованиях по 26 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских

работ. Деятельность ЛИТ направлена на развитие сетевой, информационно-вычислительной инфраструктуры, математического и программного обеспечения научно-производственной деятельности Института и стран-участниц ОИЯИ на базе Многофункционального информационно-вычислительного комплекса (МИВК) ОИЯИ.

В 2019 г. сотрудниками Лаборатории информационных технологий опубликовано 220 научных работ в реферируемых изданиях, представлено 135 докладов на международных и российских конференциях.

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ОИЯИ

Одним из основных направлений деятельности ЛИТ в 2019 г. являлось развитие МИВК ОИЯИ [1]. Оно включает в себя: развитие и совершенствование телекоммуникационной и сетевой инфраструктуры ОИЯИ; модернизацию инженерной инфраструктуры МИВК; модернизацию, развитие и создание новых компонентов МИВК для хранения, обработки и анализа данных, а именно развитие IT-инфраструктуры мегасайнс-проекта NICA; наращивание производительности и объема систем хранения данных грид-компонентов — Tier-1 и Tier-2; наращивание облачного компонента и создание интегрированной облачной среды для экспериментов ОИЯИ; расширение гетерогенной вычислительной платформы HブリIT, включающей суперкомпьютер «Говорун».

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ. В 2019 г. проведена существенная модернизация сетевой инфраструктуры ОИЯИ. Реализован проект увеличения пропускной способности телекоммуникационного канала Москва–ОИЯИ со 100 до 3×100 Гбит/с, пропускная способность опорной магистрали локальной вычислительной сети Института увеличена до 2×100 Гбит/с, построена распределенная вычислительная кластерная сеть между площадками ЛЯП и ЛФВЭ емкостью 400 Гбит/с с двойным

резервированием для повышения надежности оптической транспортной магистрали.

В настоящее время внешняя распределенная сеть ОИЯИ (рис. 1) представлена прямым каналом связи ОИЯИ–ЦЕРН и резервным каналом, проходящим через МГТС-9 в Москве и Амстердаме, обеспечивающими функционирование LHCOPN (ОИЯИ–ЦЕРН), для связи центров Tier-0 (ЦЕРН) и Tier-1 (ОИЯИ), внешней наложенной сетью LHCONE, предназначенной для центра Tier-2 (ОИЯИ), а также прямыми каналами для связи по технологии RU-VRF с коллаборацией научных центров RUNEP и с сетями RUNNet, RETN.

Распределение входящего (превышающего 25 ТБ) и исходящего трафиков по подразделениям ОИЯИ в 2019 г. приведено в таблице.

Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего назначения, Tier-1, Tier-2 и вычислительный комплекс, составил в 2019 г. около 56 ПБ. Основным является трафик с научно-образовательными сетями, составляющий 96,4 % от общего.

Локальная вычислительная сеть ОИЯИ. В 2019 г. были продолжены работы по развитию и совершенствованию сетевых компонентов IT-инфраструктуры ОИЯИ. Введена в эксплуатацию

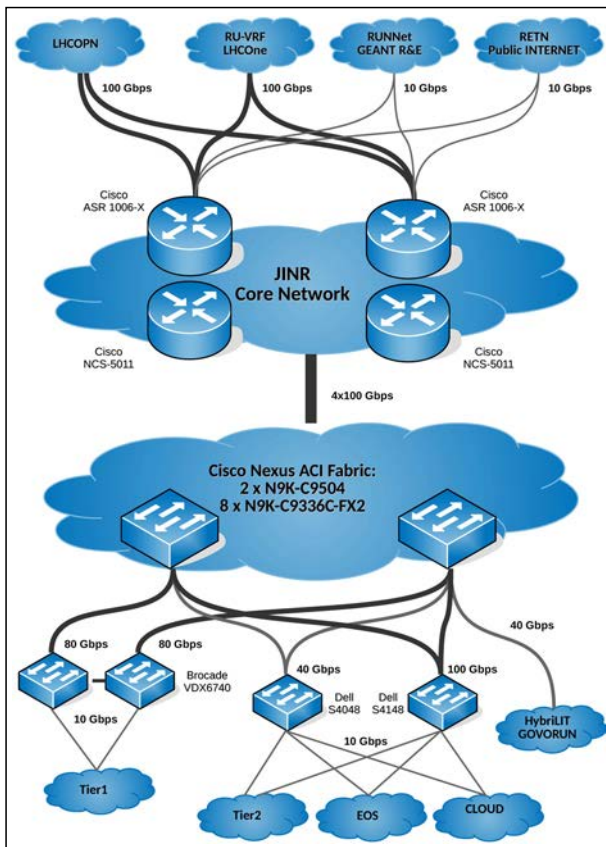


Рис. 1. Схема внешней распределенной сети ОИЯИ фабрика Cisco ACI на базе оборудования Cisco Nexus 9504 и Cisco Nexus C9336C-FX2, позволяющая подключать компоненты МИВК на скоростях 100 Гбит/с и более. Для обеспечения необходимой пропускной способности и возможности резервирования подключение фабрики к опорной сети ОИЯИ осуществляется четырьмя каналами по 100 Гбит/с. Сеть Tier-1 переведена на ACI-фабрику и имеет суммарное подключение 160 Гбит/с (4 канала по 40 Гбит/с). К ACI-фабрике подключены распределенная файловая система EOS, гетерогенная платформа HybriLIT, суперкомпьютер «Говорун», web-сервисы, Tier-2 и сети облачных вычислений.

Продолжена модернизация сетевого кластера виртуальных сервисов сетевой службы ОИЯИ. Виртуализирующий кластер сетевой службы создан с использованием открытого программного обеспечения (ПО) Proxmox по лицензии с открытым кодом GNU AGPL v3, позволяющей бесплатное использование этого кода при создании кластерных решений. Кластер обслуживает виртуальные машины сетевых сервисов ОИЯИ, такие как DNS, DHCP, RELAYs, различные сетевые базы данных, а также ряд сервисов ЛИТ и УНЦ.

Расширена функциональность системы анализа сетевого трафика с помощью написанных новых скриптов, помогающих выявлять зараженные и взломанные пользовательские компьютеры. Осуществляется поддержка Wi-Fi-сети eduoam в ЛИТ, гостинице «Дубна», Доме международных совещаний, Доме ученых, общежитии УНЦ. В системе мониторинга сети отслеживается состояние 560 хостов и более 150 сервисов. Применяется несколько видов уведомлений: сообщения по электронной почте и аварийные SMS-рассылки.

Локальная вычислительная сеть ОИЯИ содержит 8169 сетевых элементов и 15505 IP-адресов, 7512 пользователей сети, 2465 пользователей сервиса mail.jinr.ru, 1531 пользователя электронных библиотек и 358 пользователей сервиса удаленного доступа.

Инженерная инфраструктура МИВК. В 2019 г. продолжены работы по совершенствованию инженерной инфраструктуры МИВК, предназначенной для обеспечения надежной, бесперебойной и отказоустойчивой работы информационно-вычислительной системы и сетевой инфраструктуры. Использование комплексного подхода к построению инженерной инфраструктуры МИВК позволило разработать алгоритмы работы оборудования и взаимодействия отдельных систем как в нормальном режиме, так и в аварийных ситуациях, что обеспечило бесперебойную работу независимо от внешних факторов. Система гарантированного электропитания обеспечи-

Подразделение	Входящий трафик, ТБ	Исходящий трафик, ТБ
Лаборатория физики высоких энергий	414,4	689,0
Лаборатория информационных технологий	414,3	182,0
Лаборатория ядерных проблем	369,6	500,5
Университет «Дубна»	212,8	110,5
Лаборатория нейтронной физики	173,6	266,5
Лаборатория ядерных реакций	156,8	175,5
Гостинично-ресторанный комплекс	145,6	71,5
Управление ОИЯИ	100,8	266,5
Узел удаленного доступа	95,2	32,5
Лаборатория теоретической физики	61,6	58,5
Учебно-научный центр	44,8	26,0
МСЧ-9	39,2	13,0
Управление социальной инфраструктурой	39,2	32,5
Участок телефонной связи	28,0	13,0
Лаборатория радиационной биологии	28,0	19,5

вает бесперебойное электропитание подключенных потребителей, автоматический запуск дизель-генераторных установок (ДГУ), автоматическое переключение нагрузки с основной внешней сети электропитания на ДГУ и обратно, отправку сообщений на пост диспетчера в случае возникновения чрезвычайной ситуации с ДГУ.

Существующая система климатического контроля МИВК представляет собой комплекс взаимосвязанного оборудования для различных схем воздушного и жидкостного охлаждения, с помощью которых создается соответствующий температурный режим, обеспечивающий круглогодичную работу МИВК. В настоящее время система климатического контроля МИВК имеет следующие компоненты: естественное охлаждение серверного оборудования машинного зала охлажденным воздухом, подачу холодного воздуха через фальшпол с принудительным отводом горячего воздуха вентиляционными панелями, охлаждение холодного коридора мо-

дуля Tier-1 межрядными кондиционерами, жидкостное охлаждение элементов суперкомпьютера «Говорун». По типу отвода тепла система климатического контроля МИВК относится к смешанному типу, который сочетает в себе системы с испарением хладагента и системы с промежуточным хладагентом.

Дополнительные возможности и новые требования к этой системе охлаждения связаны с вводом в строй в 2018 г. суперкомпьютера «Говорун», для которого потребовалось создание системы прецизионного жидкостного охлаждения, сбалансированной для постоянной работы с высокотемпературным хладоносителем. В соответствии с условиями размещения оборудования для ОИЯИ был выбран оптимальный режим работы вычислительного шкафа при постоянной температуре хладоносителя +45 °С на входе в вычислительные узлы (с пиковым значением до +57 °С). Благодаря работе в режиме «горячая вода» в случае данного решения удалось применить круглогодичный режим естественного охлаждения с

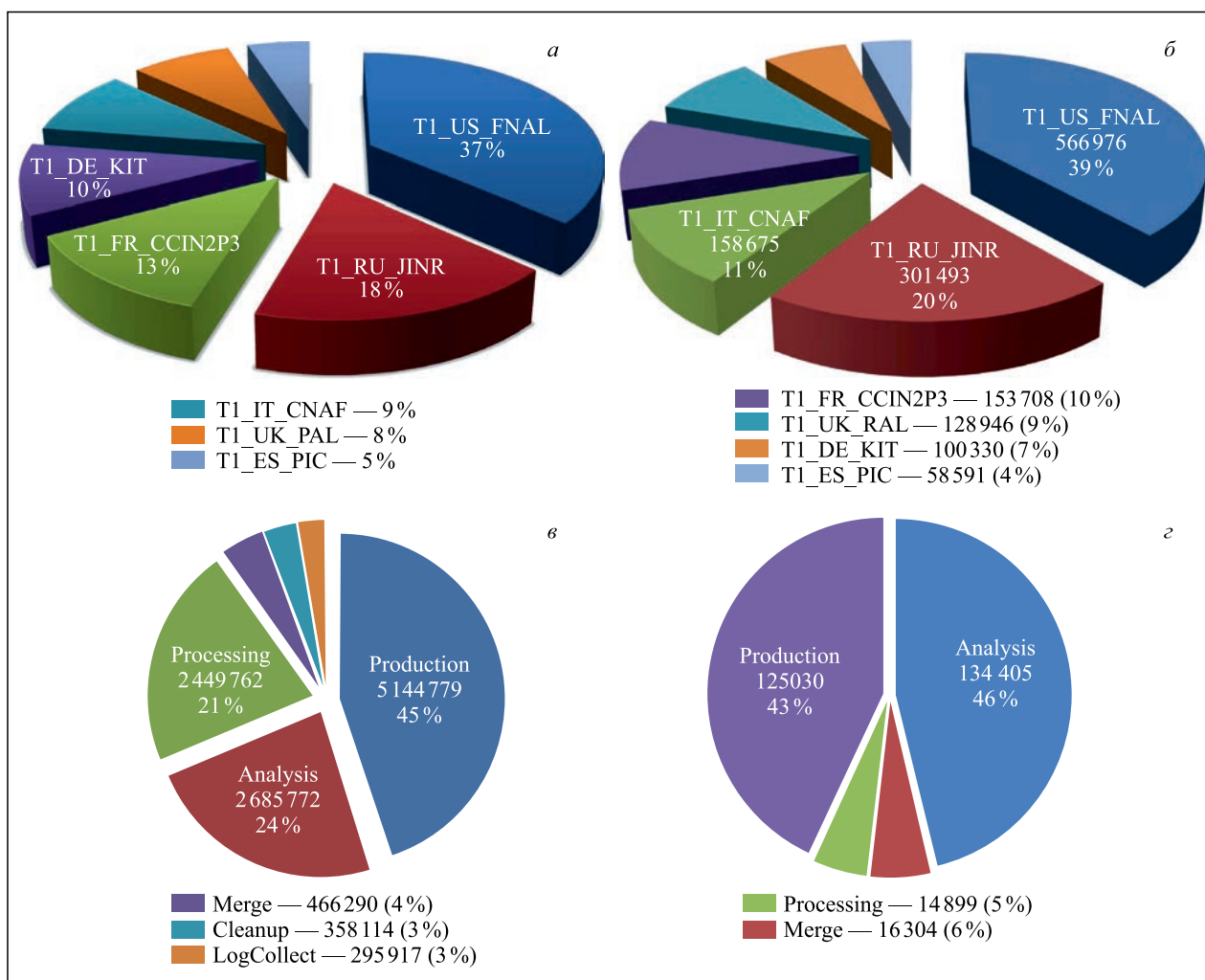


Рис. 2. Вклад мировых центров Tier-1 в обработку экспериментальных данных CMS за 2019 г.: а) распределение по нормированному времени ЦПУ в HS06 часах; б) количество обработанных событий (в млн событий). Статистика использования центра Tier-1 ОИЯИ экспериментом CMS по разным типам потоковой обработки данных за 2019 г.: в) распределение по числу задач; г) распределение по количеству событий

использованием только сухих градирен, охлаждающих жидкость с помощью окружающего воздуха в любой день года, а также полностью избавиться от фреонового контура и чиллеров. В результате среднегодовой показатель системы PUE (Power usage effectiveness), отражающий уровень эффективности использования электроэнергии, составляет более чем 1,06.

Грид-среда ОИЯИ. Грид-инфраструктура ОИЯИ [2] представлена центром уровня Tier-1 для эксперимента CMS на LHC и центром уровня Tier-2, который обеспечивает обработку данных, полученных в экспериментах ALICE, ATLAS, CMS, LHCb, BES, BIOMED, MPD, NOVA, STAR, ILC и др.

В 2019 г. система обработки данных Tier-1 для CMS была увеличена до 10 688 ядер, что обеспечило производительность 151,97 kHS06. Расширена система хранения, состоящая из дисковых массивов и долговременного хранилища данных на лентах. Общая полезная емкость дисковых серверов увеличена до 10,4 ПБ, ленточного робота IBM TS3500 — до 11 ПБ. По своей производительности Tier-1 (T1_JNR) занимает второе место среди других центров Tier-1 для эксперимента CMS (рис. 2, а). Обработано более 301 493 млн событий, что составляет 20 % от общего числа событий (рис. 2, б) и 18 % от общей загрузки ЦПУ всех центров Tier-1 для эксперимента CMS.

На рис. 2, в и г показано распределение по числу задач и количеству событий, обработанных в ОИЯИ в центре уровня Tier-1 CMS в 2019 г. по разным типам потоковой обработки данных (рекон-

струкция, моделирование, повторная обработка, анализ и т. д.).

Одной из основных функций центров уровня Tier-1 является обеспечение обмена данными со всеми мировыми сайтами, работающими на эксперимент CMS, и обеспечение хранения «сырых» экспериментальных и моделированных данных. В 2019 г. общий объем обмена данными CMS с ленточным роботом составил 9,6 ПБ, из них записано 2,1 ПБ новых файлов. Более активно использовалось дисковое хранилище: общий объем данных CMS и результатов их обработки составил с учетом обмена по протоколу dcap 119,7 ПБ, из них выходной поток — 33,4 ПБ.

Вычислительные ресурсы центра Tier-2 в 2019 г. составили 4128 ядер, что в настоящее время обеспечивает производительность 55,489 kHS06. Общая полезная емкость дисковых серверов составляет 2789 ТБ для ATLAS, CMS и ALICE и 140 ТБ для других виртуальных организаций. Сайт Tier-2 ОИЯИ является лучшим в российском консорциуме Российский грид для интенсивных операций с данными (Russian Data Intensive Grid — RDIG). В 2019 г. было обработано 3 779 038 заданий, что составляет 52,11 % от общей производительности ЦПУ RDIG (рис. 3).

На рис. 4 приведены данные по использованию сайта Tier-2 ОИЯИ виртуальными организациями в рамках грид-проектов в 2019 г.

МИВК обеспечивает проведение пользователями вычислений вне рамок грид-среды. Это необходимо как коллаборациям NOVA, PANDA, BES, NICA/MPD и др., так и локальным пользователям из лабораторий ОИЯИ. Все вычислительные мощ-

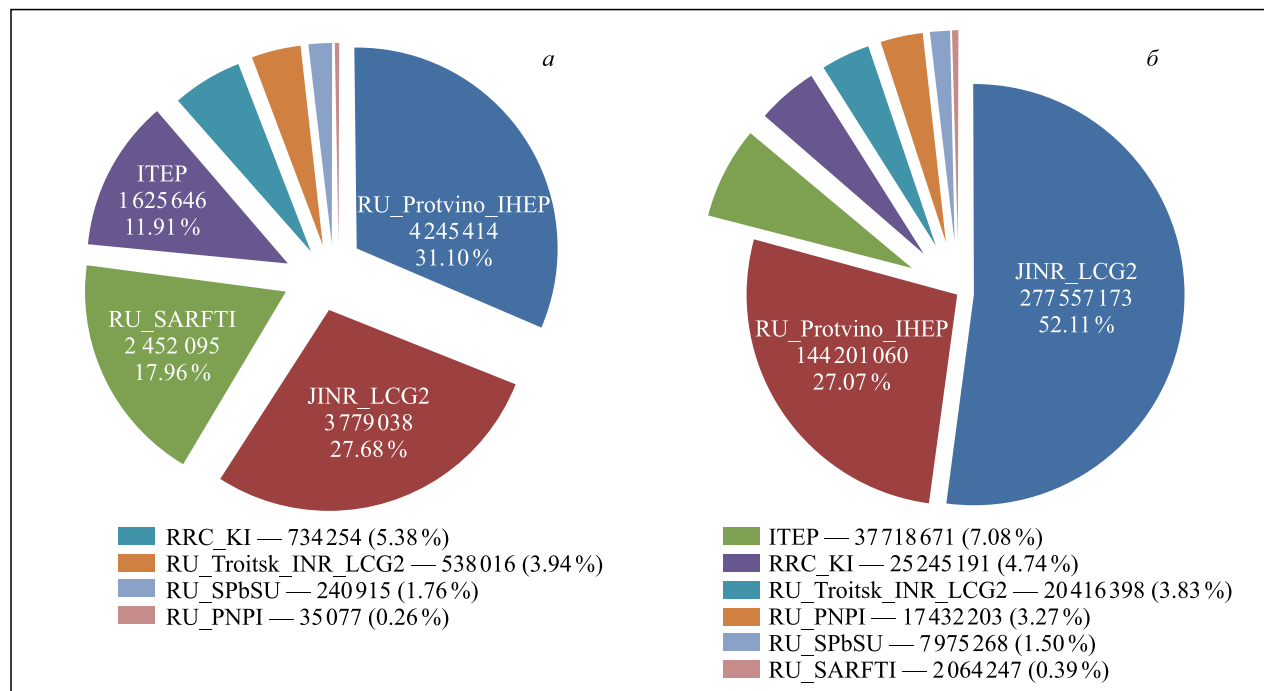


Рис. 3. Статистика работы Tier-2 сайтов организаций, входящих в российский консорциум RDIG: а) распределение по числу задач; б) распределение по нормированному времени ЦПУ в HS06 часах

ности доступны пользователям ОИЯИ и пользователям грид-среды через единую систему пакетной обработки заданий. На рис. 5 приведено распределение по времени и числу задач, выполненных на вычислительном кластере подразделениями Института и группами пользователей.

Системы хранения и доступа к данным, такие как dCache, EOS и XROOTD, обеспечивают совместную работу с данными как для локальных пользователей ОИЯИ, так и для пользователей WLCG (Worldwide LHC Computing Grid) и других виртуальных организаций. ОИЯИ присоединился к группе исследовательских центров, которые разрабатывают прототип озера данных WLCG для HL-LHC. Прототип озера данных был построен как распределенная система хранения EOS и используется для хранения и доступа к большим массивам информации. Система EOS была успешно интегрирована в структуру

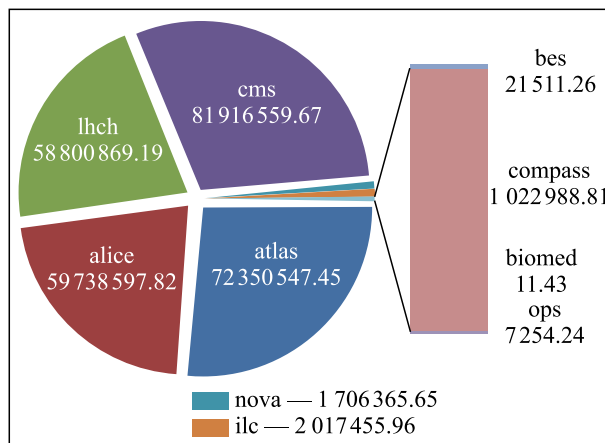


Рис. 4. Использование грид-сайта Tier-2 ОИЯИ виртуальными организациями глобальной грид-инфраструктуры. Распределение по нормированному времени ЦПУ в HS06 часах

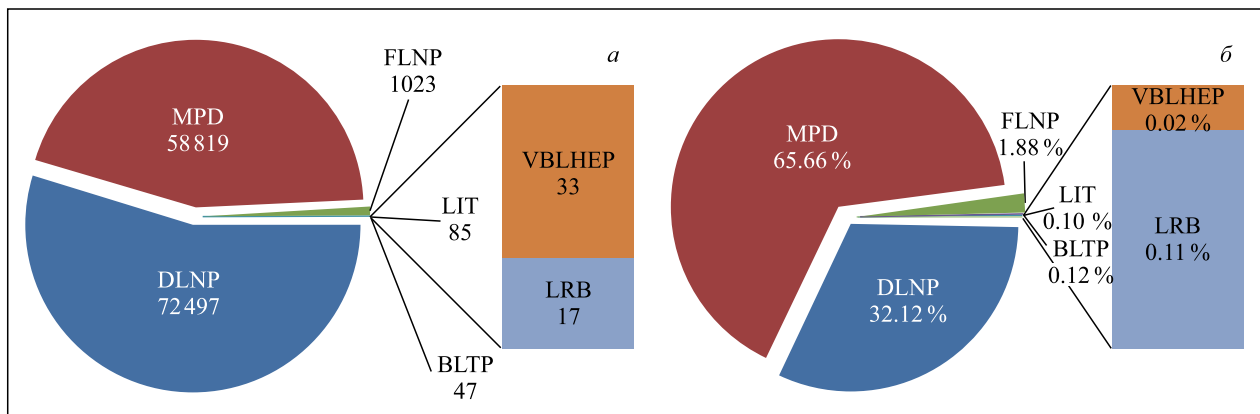


Рис. 5. Статистика использования вычислительного кластера: а) распределение по времени; б) распределение по числу задач, выполненных на вычислительном кластере подразделениями Института и группами пользователей

МИВК. В настоящее время для EOS доступно 3740 ТБ дискового пространства. В экспериментах на NICA уже используется EOS для хранения данных. EOS видна как локальная файловая система на рабочих узлах МИВК и позволяет авторизованным пользователям (по протоколу kerberos5) читать и записывать данные.

Облачная среда. В 2019 г. продолжены работы по расширению облачной среды ОИЯИ [3] и объединению счетных мощностей организаций стран-участниц Института в единую информационно-вычислительную среду. Для эффективного использования локальных вычислительных ресурсов в каждой из участвующих в объединении организаций созданы или создаются облачные инфраструктуры и осуществляется интеграция облаков каждой из партнерских организаций государств-членов ОИЯИ в распределенную платформу на основе промежуточного ПО DIRAC (Distributed Infrastructure with Remote Agent Control) [4]. На рис. 6 приведено распределение задач по облакам организаций стран-участниц.

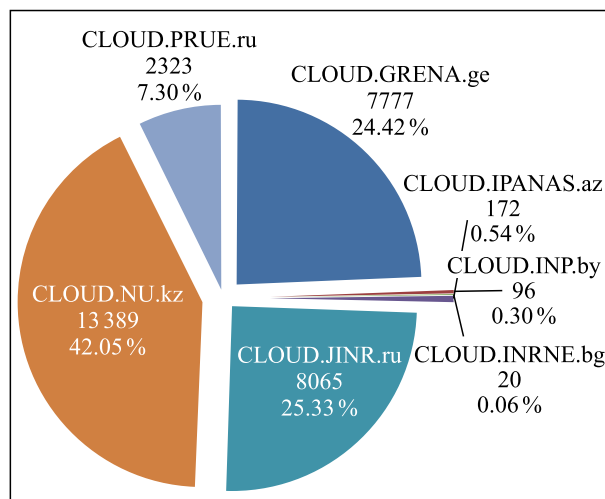


Рис. 6. Распределение задач по облакам организаций стран-участниц

Ресурсы облачной инфраструктуры были увеличены до 1564 ядер ЦПУ и до 8,5 ТБ общего объема ОЗУ. На рис. 7 представлена информация по

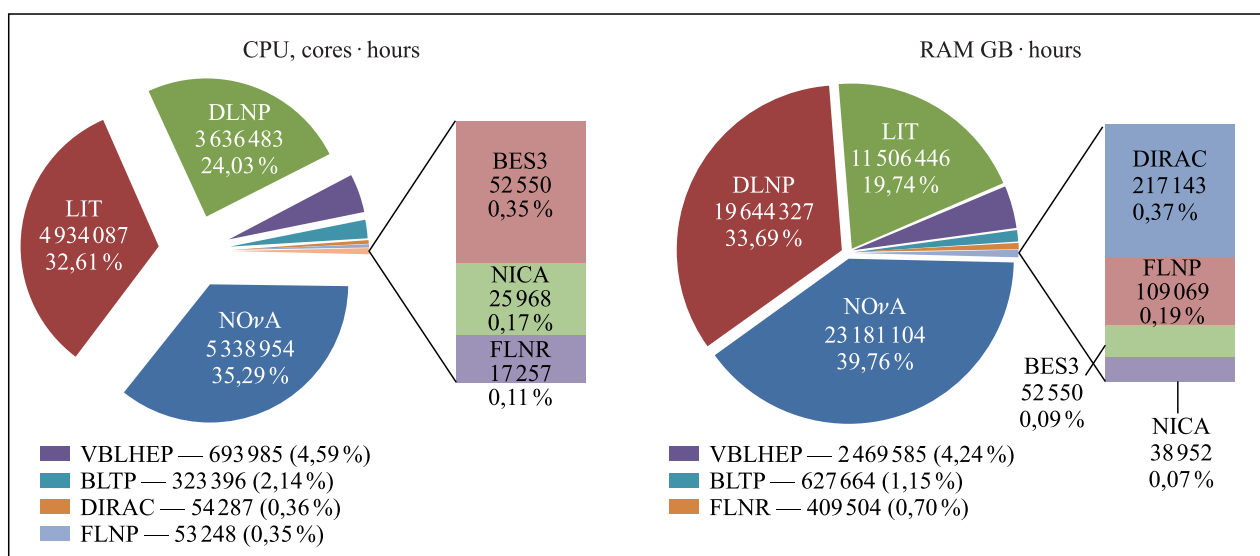


Рис. 7. Потребление ресурсов облачной инфраструктуры за 2019 г.

потреблению ресурсов облачной инфраструктуры за 2019 г., основными пользователями которой являются ЛЯП, ЛИТ и эксперимент NOvA.

В облаке ОИЯИ развивался и совершенствовался сервис, предоставляющий доступ к ресурсам МИВК для выполнения широкого спектра научных расчетов посредством проблемно-ориентированного веб-интерфейса [5], который обеспечивает расширенные возможности для запуска задач, уведомлений пользователю о статусе задач. Изменен доступ к результатам расчетов: когда задание выполнено, выходные данные загружаются во внешнее файловое хранилище, где они становятся доступны по автоматически сгенерированному уникальному URL-адресу для загрузки пользователем и дальнейшего анализа и/или визуализации.

Продолжены исследования, проводимые совместно с ЛНФ в рамках международной программы UNECE International Cooperative Program (ICP) Vegetation, по мониторингу и прогнозированию процессов загрязнения воздуха в странах Европы и Азии [6]. В 2019 г. разработано мобильное приложение, которое позволяет в соответствии со стандартами UNECE ICP Vegetation в автоматическом режиме заполнять информацию о местах отбора проб мхов. Приложение интегрировано с системой управления данными программы ICP Vegetation, так что всю информацию о местах отбора проб можно импортировать в систему. С использованием глубоких нейросетей выполнены прогнозы по загрязнению некоторыми тяжелыми металлами для Норвегии, Румынии и Сербии. Методика отработана не только в региональном масштабе, но и в масштабах города.

Гетерогенная инфраструктура. Гетерогенная инфраструктура МИВК ОИЯИ состоит из суперкомпьютера «Говорун» и учебно-тестового полигона, объединенных посредством единой программно-информационной среды в гетерогенную платформу

HybriLIT (<http://hlit.jinr.ru/>). Ресурсы этой платформы используются для решения задач, требующих массивно-параллельных расчетов в различных областях ядерной физики и физики высоких энергий, физики конденсированных сред, радиобиологии и в других исследованиях, проводимых в ОИЯИ, в том числе для развития компьютеринга мегапроекта NICA.

Исходя из стремительного развития IT-технологий и запросов пользователей в ноябре 2019 г. была проведена модернизация суперкомпьютера — переход на новые процессоры Intel® Xeon® Scalable gen2 (модели Intel® Xeon® Platinum 8268) и новейшие высокоскоростные твердотельные диски Intel® SSD DC P4511 с интерфейсом NVMe емкостью 2 ТБ. В результате модернизации производительность CPU-компонента увеличилась в три раза, а совокупная пиковая производительность суперкомпьютера достигла 860 TFlops для операций с двойной точностью и 1,7 PFlops для операций с одинарной точностью, что, в свою очередь, позволило CPU-компоненту суперкомпьютера «Говорун» занять 10-е место в списке топ-50 самых мощных суперкомпьютеров России и стран СНГ.

CPU-компонент суперкомпьютера реализован на высокоплотной архитектуре «РСК Торнадо» с прямым жидкостным охлаждением, которое позволяет обеспечить высокую плотность вычислительных узлов (150 узлов на один вычислительный шкаф) и высокую энергоэффективность (порядка 10 GFlop/Вт).

Суперкомпьютер «Говорун» является гиперконвергентной программно-определяемой системой и обладает уникальными свойствами по гибкости настройки под задачу пользователя, обеспечивая максимально эффективное использование вычислительных ресурсов суперкомпьютера. Для ускорения работы с данными в суперкомпьютер «Говорун» была имплементирована сверхбыстрая система хранения данных (ССХД) под управлением файловой системой

Lustre. Общая емкость ССХД в настоящее время составляет 256 ТБ, скорость ввода/вывода данных — 300 ГБ/с.

Эксплуатация первой очереди суперкомпьютера «Говорун» позволила провести целый ряд ресурсоемких вычислений в области квантовой хромодинамики на решетках, качественно повысить оперативность моделирования динамики столкновений релятивистских тяжелых ионов, ускорить процесс генерации и реконструкции событий для экспериментов мегасайенс-проекта NICA, провести расчеты радиационной безопасности экспериментальных установок ОИЯИ, существенно ускорить исследования в области радиационной биологии и других научно-прикладных задач. Результаты этих научных исследований были опубликованы более чем в 50 ведущих мировых научных изданиях (http://hlit.jinr.ru/users_publications/). В течение 2019 г. всеми группами, проводящими расчеты на суперкомпьютере, было вы-

полнено свыше 260 000 задач на всех вычислительных компонентах. Распределение вычислительных ресурсов между группами пользователей показано на рис. 8. Как видно из приведенных диаграмм, основными пользователями суперкомпьютера являются ЛТФ, ЛИТ и ЛФВЭ. При этом следует отметить, что 85 % ресурсов суперкомпьютера задействовано для мегапроекта NICA как для теоретических расчетов, так и для генерации, реконструкции событий [7] с использованием Interware DIRAC (рис. 9).

Средняя загрузка по вычислительным компонентам в 2019 г. составила: Skylake — 95,61 %, KNL — 57,12 %, DGX — 84,59 %.

Создается офлайн компьютерный комплекс для моделирования, обработки, анализа и хранения данных в рамках проекта NICA, состоящий из территориально распределенных онлайн и трех офлайн кластеров, связанных между собой высокоскоростной компьютерной сетью с пропускной способностью

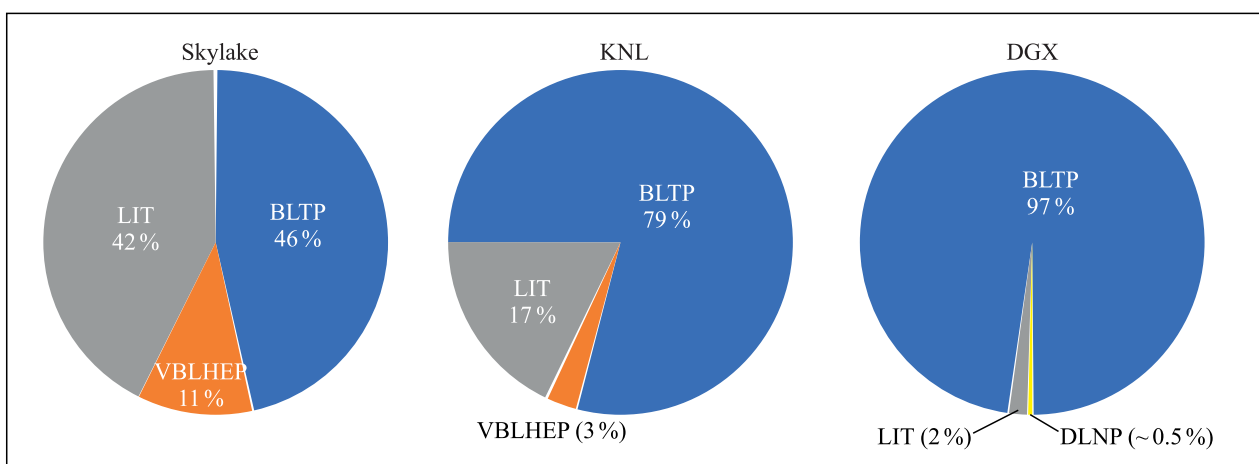


Рис. 8. Распределение ресурсов между группами пользователей по вычислительным компонентам суперкомпьютера, компонент Skylake содержит 40 вычислительных узлов с двумя CPU Intel® Xeon 6145, компонент KNL — 21 вычислительный узел с процессором Intel® Xeon Phi™ 7290, компонент DGX реализован на базе пяти серверов NVIDIA DGX-1 с восемью GPU NVIDIA Tesla V100 в каждом

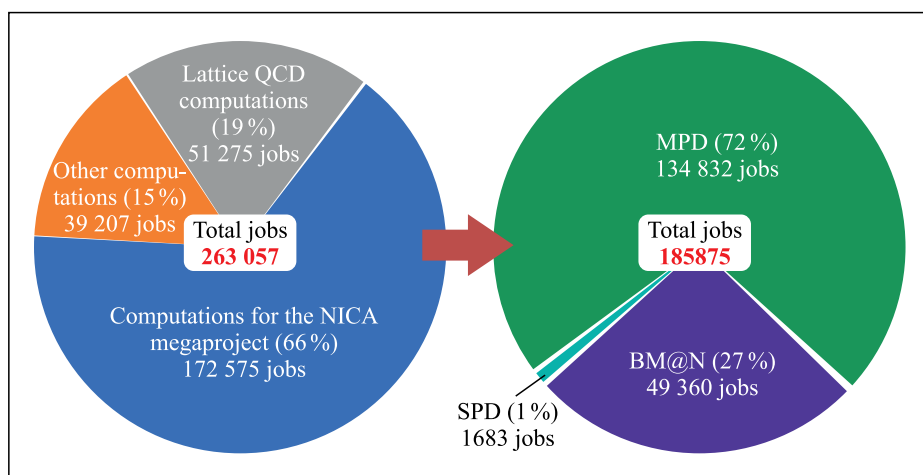


Рис. 9. Количество задач, выполненных для мегапроекта NICA. Доля задач, связанных с теоретическими исследованиями в рамках квантовой хромодинамики на решетках, составила 19%, генерация и реконструкция событий для всех экспериментов на NICA — 66%. При этом из этих 66% задач доля MPD составила 72%

4 × 100 Гбит/с. Вычислительно-информационный офлайн кластер NICA в ЛИТ организован на базе МИВК ОИЯИ как распределенный масштабируемый гибридный кластер, что позволяет эффективно и без дополнительных затрат организовать компьютинг для проекта NICA по требованию различного класса задач и разных пользователей. Основной задачей офлайн кластера ЛИТ является создание двухуровневой (диско-ленточной) системы хранения для экспериментов NICA, поскольку после первого этапа этих экспериментов потребуются значительные объемы хранения (от 2,5 до 70 ПБ в год).

В настоящее время с помощью Interware DIRAC были объединены вычислительные ресурсы МИВК

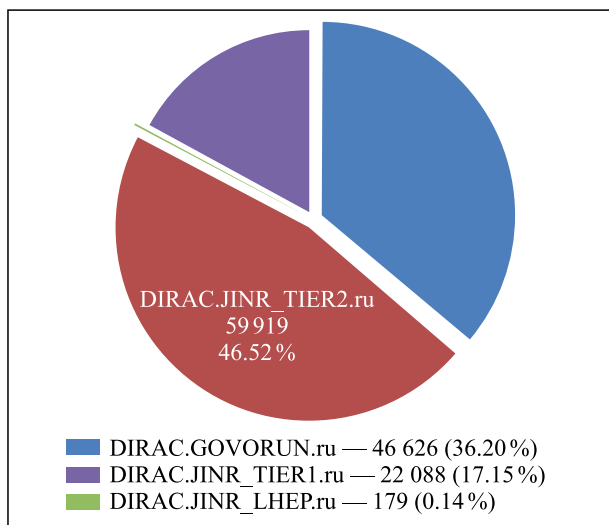


Рис. 10. Статистика по задачам моделирования для MPD на компонентах МИВК

ОИЯИ: Tier-1/Tier-2, суперкомпьютер «Говорун», облако ОИЯИ и ресурсы хранения ССХД Lustre, dCache и EOS [7]. В рамках генерации данных методом Монте-Карло для эксперимента MPD с использованием платформы DIRAC на компонентах МИВК было выполнено более 120 000 задач. На рис. 10 приведено распределение задач моделирования по компонентам МИВК через DIRAC.

Система мониторинга. Для обеспечения надежной работоспособности МИВК создана и расширяется многоуровневая система мониторинга, которая работает в режиме 24 × 365 и позволяет контролировать системы климат-контроля и энергоснабжения, локальное сетевое оборудование, телекоммуникационные линии и вычислительные узлы, выполняемые задания, дисковые и ленточные системы хранения. Она основана на различных технологиях, таких как Nagios, Icinga2, Grafana, и системах, разработанных в ЛИТ. В настоящее время система мониторинга контролирует все виды оборудования МИВК. Количество узлов, включенных в мониторинг, составляет более 2000.

В 2019 г. проводилось усовершенствование программного комплекса [8] для анализа данных эксперимента COMPASS, который с августа 2017 г. работает в производственном режиме. Реализовано несколько цепочек обработки данных: реконструкция реальных данных, фильтрация событий. Реализована цепочка обработки задач моделирования методом Монте-Карло и реконструкции. В обработке данных на постоянной основе участвуют два грид-узла: ЦЕРН и ОИЯИ. В 2019 г. к данной системе также подключены суперкомпьютеры Stampede 2 и

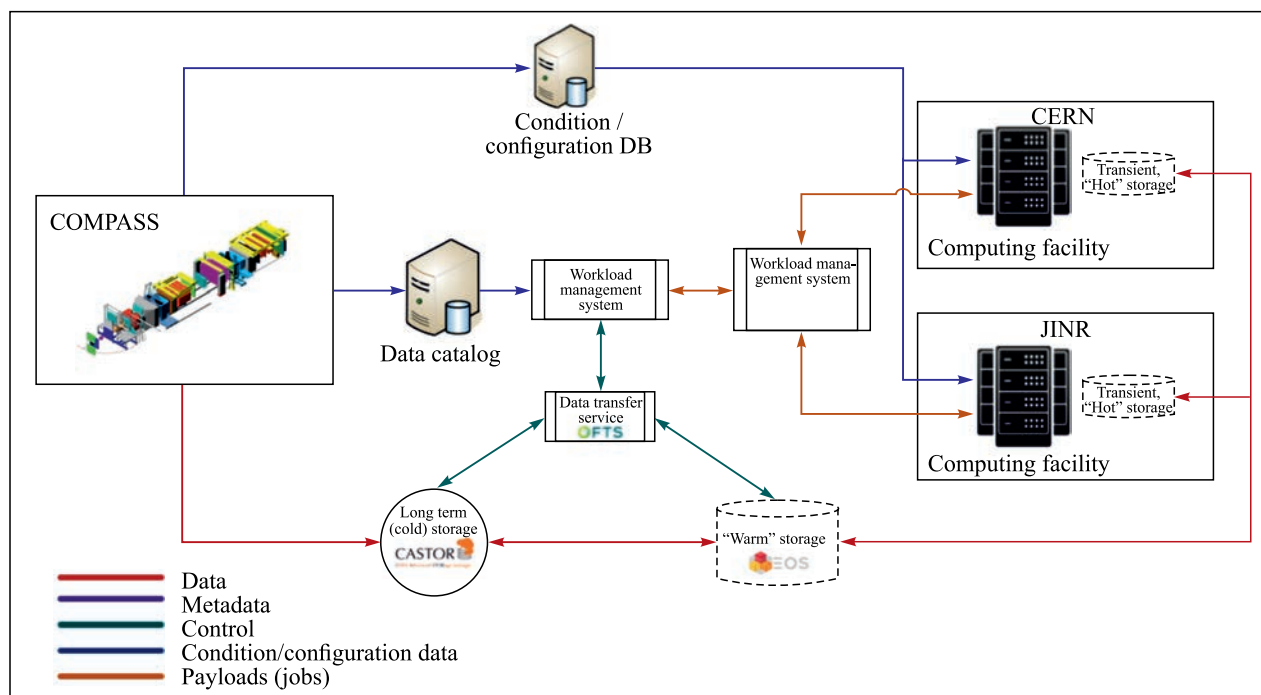


Рис. 11. Архитектура системы и рабочие потоки данных процесса обработки данных эксперимента COMPASS

Frontera из Texas Advanced Computing Centre. Текущая архитектура системы и процесс обработки представлены на рис. 11.

Одним из важных предметов анализа в различных областях являются потоковые данные, т. е. непрерывно поступающая новая информация, по которой необходимо как проводить исторический анализ, так и принимать оперативные решения. В настоящее время для исследования потоковых данных наиболее эффективным представляется использование технологий больших данных. Для этих целей в ЛИТ создан прототип аналитической платформы. Развернуты следующие сервисы: 1) Apache Spark для анализа поступающих данных в памяти; 2) система обработки и хранения потоковых данных Apache Kafka для обеспечения бесперебойной передачи и промежуточного хранения данных; 3) Mesos для управления ресурсами вычислительного кластера; 4) Elasticsearch для первичного профилирования и анализа, а также хранения поступающих данных; 5) сервер Docker для развертывания вспомогательных служб и сервисов.

Продолжено выполнение работ по развитию системы управления проектом АРТ EVM для NICA: разработана англоязычная версия системы, необходимая для предоставления информации наблюдательному совету; разработан сводный отчет, необходимый для оперативного согласования планируемых расходов в соответствии с соглашением с Российской Федерацией по дополнительному финансированию проекта NICA; осуществлялось текущее сопровождение и развитие системы.

Выполнен ряд работ по развитию и текущему сопровождению системы электронного документооборота (СЭД) «Дубна»: разработаны и запущены в эксплуатацию новые документы, разработан модуль сбора статистики, разработаны модули подсистемы электронного архивного хранения и поиска договоров капитального строительства и ремонтно-строительных работ.

Осуществлялось развитие по запросам пользователей, а также текущее сопровождение систем персональной информации о научной деятельности сотрудников (ПИН), информационно-справочной системы (ИСС), базы документов ОИЯИ и др., про-

грамм IC, обучение и поддержка пользователей, разрабатывались новые модули. Разработан и введен в эксплуатацию модуль по сопровождению конференций, позволяющий вести полный финансовый учет мероприятий, проводимых ОИЯИ. Для упрощения оплаты участия в них был создан специализированный сайт приема интернет-платежей (эквайринг).

В рамках развития управленческого учета создана система дополнительной аналитики Проблемно-тематического плана ОИЯИ, позволяющая учитывать затраты в рамках отдельных проектов внутри одной темы. Данная система прошла успешную тестовую эксплуатацию в трех лабораториях.

В 2019 г. в среде CMS Drupal создана новая версия портала ЛИТ — <http://lit.jinr.ru>. Разработан и запущена в эксплуатацию информационная система научной аттестации ОИЯИ (ИСНА) — <https://dissertations.jinr.ru/>, предназначенная для подачи документов соискателями ученых степеней кандидата и доктора наук в советы ОИЯИ по защите диссертаций, а также для дальнейшей работы с этими документами ученых секретарей и членов советов. Осуществлялось сопровождение портала «Визит-центр», web-сайта журналов «ЭЧАЯ» и «Письма в ЭЧАЯ». Продолжена традиционная разработка, создание и поддержка web-сайтов конференций, симпозиумов по заявкам лабораторий и других подразделений ОИЯИ.

Совместно с ЛФВЭ опубликован обзор, посвященный исследованию применяемых в экспериментах в области физики высоких энергий систем сбора и обработки информации общего функционирования, информационных систем и баз данных, их классификации. В результате проведенного исследования выделены системы и компоненты, реализация или адаптация которых наиболее целесообразна в экспериментах комплекса NICA [9].

В 2019 г. выполнена работа, связанная с разработкой интерфейса взаимодействия промежуточного программного обеспечения jAliEn и центральных сервисов эксперимента ALICE. Разработан код, интегрированный в среду jAliEn, который позволяет с помощью Java Websocket идентифицировать пользователей, создавать рабочие сессии, а также отправлять задачи на центральные сервисы [10].

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.

При обработке больших данных часто возникает задача нахождения наборов одинаковых записей во всем объеме массива информации. В качестве нового подхода к соединению записей было проведено исследование применения методов locality-sensitive hashing к поиску ближайших строк с точки зрения

расстояния редактирования (edit distance). Разработан метод для ускорения соединения записей в больших данных. Показана высокая производительность этого подхода к снижению размерности и поиску ближайших соседей в многомерном векторном пространстве [11].

В рамках проекта NICA ОИЯИ выполнено трехмерное моделирование мультипольного корректора коллайдера и вертикального выходного магнита. Проведено исследование влияния параметров магнита на распределение магнитного поля в рабочих зонах магнита [12].

На основе опыта проектирования геометрической базы данных для эксперимента CBM разработан прототип геометрической базы данных для эксперимента BM@N [13]. Разработанная информационная система включает базу данных, доступные и компактные инструменты графического пользовательского интерфейса и инструменты API в виде набора макросов ROOT.

Проведено исследование, связанное с изучением основных характеристик детектора MPD ускорительного комплекса NICA, с использованием данных о протон-протонных взаимодействиях, полученных при моделировании данного детектора методом Монте-Карло [14]. Эти результаты могут быть использованы для обоснования необходимости создания данного детектора и разработки триггерной системы высокого уровня с помощью методов машинного обучения.

Для детектора GEM эксперимента BM@N на NICA активно разрабатываются и тестируются новые эффективные методы реконструкции траекторий частиц на основе графической нейронной сети. Данный подход хорошо адаптирован для решения известной проблемы ложных хитов, присущей стриповым детекторам, таким как GEM, с помощью алгоритмов поиска минимального связующего дерева [15].

В рамках модели Намбу–Иона-Лазинио с петлей Полякова рассмотрен пик, обнаруженный экспериментально в отношении числа странных каонов к нестранным пионам в области энергий $\sqrt{s}_{NN} = 8-10$ ГэВ [16]. В результате исследования было показано, что при низких энергиях столкновения ионов (больших плотностях) наблюдается расщепление в спектре масс каонов с разными знаками, что может быть причиной разницы в поведении отношения каонов к пионам с разными знаками; величина пика отношения K^+/π^+ в модели зависит от свойств вещества (странного и барионного химических потенциалов и температуры); положение пика существенно зависит от кривизны положения фазовой диаграммы.

Найден набор параметров модели HIJING (Heavy Ion Jet INteraction Generator), широко используемой для моделирования ядро-ядерных соударений, и предложены изменения модели, которые позволяют описать экспериментальные данные коллабораций NA49 и NA61/SHINE о протон-протонных взаи-

модействиях при импульсах налетающих протонов в системе покоя протонов мишени от 20 до 158 ГэВ/с. Модифицированная модель использовалась при анализе данных о ядро-ядерных соударениях при высоких энергиях, в результате показано, что модель позволяет описать основные характеристики этих взаимодействий [17].

С помощью модели UrQMD, дополненной статистической моделью мультифрагментации (SMM), рассчитаны параметры реакций $p, d, He, C + C, Ta$ и $C + Ne, Cu$ при импульсах 4,2, 4,5 и 10 ГэВ/с на нуклон. Азимутальные корреляции пионов и протонов, полученных в перечисленных реакциях, рассчитаны и сопоставлены с экспериментальными данными, полученными в ЛФВЭ на установке SKM-200-GIBS и в пропановой пузырьковой камере. Между расчетами с помощью UrQMD и SMM и экспериментальными данными было достигнуто хорошее согласие [18].

Проведены моделирование методом Монте-Карло эксперимента по измерению упругого рассеяния ионов ^{15}N на ядрах ^{11}B и анализ систематических ошибок, возникающих при извлечении сечения упругого рассеяния из экспериментальных данных, в рамках фреймворка ExpertRoot [19]. Разработанное программное обеспечение будет использоваться для планирования и анализа подобных экспериментов в будущем.

Разработано множество улучшений для алгоритма реконструкции траектории частиц на одном слое детекторов CSC (Cathode Strip Chambers) эксперимента CMS [20]. Для разграничения перекрывающихся сигналов был принят вейвлет-подход. Для камеры специальной геометрии ME1/1 была проведена настройка реконструкции, в результате чего недостатки в проблемных областях были практически устранены.

Разработка разрывных hp -адаптивных схем с параллельными алгоритмами двухуровневых методов декомпозиции областей позволила получить высокоточные грид-проекционные 3D-решения с доказанной сходимостью. Численно продемонстрировано преимущество предложенного метода перед другими известными методами аппроксимации высокого порядка [21]. В рамках сотрудничества с ЛНФ для экспериментов с нейтронами продолжены 3D-вычисления для нахождения оптимальной конфигурации магнитного устройства с сильно однородными магнитными полями.

Для отделения нейтронного шума от медленных изменений мощности ИБР-2М разработаны алгоритмы, основанные на методе базисных элементов. Они применялись как к статическому, так и динамическому состоянию реактора в диапазоне 0–2 МВт. Скорость алгоритмов адекватна для мониторинга в режиме реального времени [22].

В сотрудничестве с ЛНФ на основе метода разделенных формфакторов (РФФ) проведен анализ экспериментальных данных малоуглового рассеяния

нейтронов (МУРН) и рентгеновских лучей (МУРР) для образцов различных полидисперсных везикулярных систем, включая фосфолипидную транспортную наносистему. Для повышения производительности вычислений процедура фитирования параметров модели РФФ к экспериментальным данным МУРН и МУРР реализована с использованием технологий MPI. Эффективность параллельной реализации подтверждена тестовыми расчетами на кластере HybriLIT [23].

Исследована модель φ_0 -джозефсоновских переходов в системе сверхпроводник–ферромагнетик–сверхпроводник [24]. Для численного моделирования в широком диапазоне параметров, требующего большого количества времени, разработан и реализован на кластере HybriLIT и суперкомпьютере «Говорун» параллельный компьютерный код MPI/C++.

Проведено численное исследование эффективности трех различных типов алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений с ленточной матрицей, полученных из дискретизации параболических нелинейных уравнений в частных производных. Анализ производительности выполнен с использованием высокопроизводительной вычислительной платформы HybriLIT и кластера Avitohol [25].

Проведено молекулярно-динамическое моделирование эффекта дальнего действия при облучении металлических мишеней нанокластерами, показавшее возникновение слияния высокотемпературных движущихся областей [26]. Температура в области слияния резко возрастает, превышая температуру плавления мишени. Показано, что возникают структур-

ные изменения кристаллической решетки на глубине мишени, превышающей глубину проникновения нанокластеров.

Разработаны методы и алгоритмы построения конечно-разностных схем для систем уравнений в частных производных, обладающих свойством сильной консистенции [27].

Для изучения конструктивных моделей сложных квантовых систем разработан эффективный алгоритм [28], реализованный для разложения представлений сплетений конечных групп в неприводимые представления.

Предложен метод, позволяющий свести фейнмановские интегралы, зависящие от большого числа переменных (скалярных инвариантов и масс), к комбинации интегралов с существенно меньшим числом переменных. Метод основан на использовании функциональных уравнений, предложенных ранее автором [29].

Для количественной оценки степени соответствия «классичности-квантовости» введен глобальный индикатор [30], определяемый как относительный объем подпространства с положительной функцией Вигнера пространства состояний N -мерной квантовой системы. Данный индикатор проиллюстрирован для ансамбля кубитов и кутритов Гильберта–Шмидта.

Проведены вычислительные эксперименты по квантовой телепортации двухкубитных белловских состояний, проведенной на пятикубитном квантовом компьютере IBM Q. Проведено сравнение с телепортацией, выполненной на классическом квантовом симуляторе Фейнмана, написанном на Maple [31].

НАУЧНО-ПРИКЛАДНЫЕ РАБОТЫ

В продолжение работ по проекту РФФИ разработано мобильное приложение для обнаружения болезней растений, использующее современную облачную инфраструктуру и технологии глубокого обучения для обеспечения нового уровня обслуживания фермерского сообщества [32]. Приложение позволяет пользователям отправлять фотографии и текстовые описания больных растений и узнавать причину заболевания и способ лечения.

Усовершенствованы программы для расчета динамики пучка сверхпроводящего циклотрона SC230 для протонной терапии, разрабатываемого в ОИЯИ с информационно-вычислительной поддержкой ЛИТ в сотрудничестве с Институтом физики плазмы

(Хэфэй, Китай) [33]. Предложены новые алгоритмы, в которых компоненты магнитного поля вне срединной плоскости вычисляются до четвертого порядка. Реализован алгоритм поиска равновесной орбиты для большого числа частиц с разными энергиями с хорошей скоростью вычисления.

Рассмотрены некоторые подходы к интеллектуальному анализу текста в применении к автоматизированному мониторингу рынка труда. Предложена схема построения аналитической системы на основе технологий больших данных. На основе предложенных методов создана система мониторинга российского рынка труда [34].

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

Результатом совместных работ ЛИТ и Института физики НАН Азербайджана за 2019 г. в области информационных технологий является создание вто-

рого сегмента грид-инфраструктуры в рамках грид-сайта AZ-IFAN. Грид и облачная инфраструктура работают в режиме production [35].

В сотрудничестве с коллегами из Болгарии проведены расчеты микроскопических оптических потенциалов и соответствующих дифференциальных сечений квазиупругого рассеяния ядер $^{12,14}\text{C}$ на ядре ^{12}C при энергии 56 МэВ/нуклон и на протонах при энергии 700 МэВ с использованием разных моделей плотностей [36]. Получено хорошее согласие теоретических расчетов с имеющимися экспериментальными данными как для процессов квазиупругого рассеяния, так и для процессов распада.

В рамках соглашения о сотрудничестве между ОИЯИ и IKF (Франкфурт, Германия) в ЛИТ выполнена работа, в которой представлены данные сверхвысокого разрешения по полностью дифференциальным сечениям однократной ионизации гелия, вызванной ударом протонов с энергией 1 МэВ [37].

СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

С 1 по 5 июля прошла 10-я Международная конференция «Математическое моделирование и вычислительная физика» (ММСР'2019) в г. Высокие Татры (Словакия). Ее организаторами, кроме ЛИТ ОИЯИ, выступили Национальный научно-исследовательский институт физики и ядерной технологии им. Х. Хулубея (IFIN-HH) (Бухарест, Румыния), Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук (Кошице, Словакия), Технический университет (Кошице, Словакия), Университет им. П. Й. Шафарика (Кошице, Словакия). В работе ММСР'2019 приняли участие более 100 ученых и специалистов из ОИЯИ и 15 стран: Армении, Белоруссии, Болгарии, Великобритании, Германии,

В отличие от ранее опубликованных данных исследуется другой режим кинематических условий с точки зрения передачи импульсов и энергий электронов. Первое борновское приближение (ПБП) согласуется с экспериментом в кинематическом режиме рядом с порогом Бете. Рассчитанный бинарный пик смещается относительно эксперимента вдали от этой области. Для решения данной задачи проанализировано несколько теоретических механизмов, выходящих за рамки обычной теории ПБП. Эти механизмы включают в себя модель ЗС (три кулоновские функции), эффективные заряды, T -матрицы вне оболочки вместо парных потенциалов и квазиклассическое взаимодействие после столкновения. Комбинация этих механизмов может объяснить наблюдаемое расхождение.

Египта, Индии, Канады, Молдавии, России, Румынии, Словакии, США, Финляндии и Чехии.

В рамках этой конференции прошла международная компьютерная школа «Машинное обучение, параллельные и гибридные вычисления и анализ больших данных». Всего в работе школы приняли участие 26 студентов и аспирантов из Словакии, Румынии и России. Опубликованы труды конференции (Web Conf. Math. Modeling and Comput. Physics (ММСР 2019) // *Eur. Phys. J.* 2020. V. 226).

30 сентября – 4 октября при участии ЛИТ прошел 27-й Международный симпозиум по ядерной электронике и компьютерингу (NEC'2019).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dolbilov A. et al. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 16–22.
2. Baginyan A. et al. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 321–325.
3. Balashov N. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 185–189.
4. Balashov N. et al. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 256–260.
5. Balashov N., Kutovskiy N., Priakhina D., Sokolov I. // *Eur. Phys. J. Web Conf.* “ММСР 2019”. Selected papers. 2020. V. 226. P. 03002-1–03002-4.
6. Uzhinskiy A., Ososkov G., Frontasyeva M. // *Adv. Ecol. Environ. Res.* 2019. V. 4, Iss. 6. P. 168–176.
7. Belyakov D. V. et al. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 316–320.
8. Petrosyan A., Malevanniy D. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 94–98.
9. Александров Е.И. и др. // *Современные информационные технологии и ИТ-образование.* 2019. Т. 15, № 3. С. 645–650.
10. Кореньков В.В., Кондратьев А.О., Бондяков А.С. // *Современные информационные технологии и ИТ-образование.* 2019. Т. 15, № 3. С. 573–585.
11. Kadochnikov I. S., Papoyan V. V. // CEUR Workshop Proc. 2019. V. 2507. P. 219–224.
12. Akishin P. G., Sapozhnikov A. A. // *Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science.* 2019. V. 27, No. 1. P. 60–69.
13. Akishina E., Alexandrov E., Alexandrov I., Filozova I., Gertsenberger K., Ivanov V., Priakhina D., Shestakova G. // *Eur. Phys. J. Web Conf.* “ММСР 2019”. Selected papers. 2020. V. 226. P. 03003-1–03003-4.
14. Zinchenko D. A., Nikonov E. G., Zinchenko A. I. // *Компьютер. исслед. и моделирование.* 2019. Т. 11, № 1. С. 87–94.
15. Baranov D., Goncharov P., Ososkov G., Shchavalev E. // *AIP Conf. Proc.* 2019. V. 2163. P. 040001-1–040001-6; <https://doi.org/10.1063/1.5130100>.

16. *Friesen A. V., Kalinovsky Yu. L., Toneev V. D.* // Phys. Rev. C. 2019. V.99. P.045201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.045201>.
17. *Uzhinsky V. V., Galoyan A.* // Book of Abstracts of the 69th Intern. Conf. “Nucleus-2019” on Nucl. Spectroscopy and Nucl. Struct. “Fundamental Problems of Nuclear Physics, Nuclei at Borders of Nucleon Stability, High Technologies”, Dubna, July 1–5, 2019. P.291; Bull. of the RAS: Phys. (submitted).
18. *Chkhaidze L., Chlachidze G., Djobava T., Galoyan A., Kharkhelauri L., Togoo R., Uzhinsky V.* // Eur. Phys. J. A. 2019. V.55, No.7. 7 p. FERMILAB-PUB-18-497-TD; arXiv:1808.02661[nucl-ex]; <https://doi.org/10.1140/epja/i2019-12674-9>.
19. *Satyshv I., Belogurov S., Kozlov M., Mauyey B., Ovcharenko E., Schetinin V.* // AIP Conf. Proc. 2019. V.2163. P.060003-1–060003-6; <https://doi.org/10.1063/1.5130109>.
20. *Voytishin N. for CMS Collab.* // CEUR Workshop Proc. 2019. V.2507. P.120–124; CMS Note CR-2019/268.
21. *Yuldasheva M. B., Yuldashev O. I.* // Comp. Math. Modeling. 2019. V.30, No.3. P.267–284; doi: 10.1007/s10598-019-09453-y.
22. *Korepanova N. V., Dikusar N. D., Pepelyshev Yu. N., Dima M.* // Ann. Nucl. Energy. 2019. V.131. P.475–482.
23. *Kiselev M. A., Zemlyanaya E. V. et al.* // J. Surf. Invest.: X-ray. Synchrotron and Neutron Techn. 2019. V.13, No.1. P.111–116.
24. *Panayotova S., Bashashin M., Zemlyanaya E., Atanasova P., Shukrinov Yu., Rahmonov I.* // Eur. Phys. J. Web Conf. 2020. V.226. P.02018-1–02018-4.
25. *Veneva M., Ayriyan A.* // Stud. Comp. Intelligence. 2019. V.793. P.407–419; doi:10.1007/978-3-319-97277-0_33.
26. *Шарунов З. А. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2019. Т.83, №10. С.1306–1310.
27. *Michels D. L., Blinkov Yu. A., Gerdt V. P., Lyakhov D. A.* // J. Math. Sci. 2019. V.240, No.5. P.665–677.
28. *Kornyak V. V.* // Lecture Notes Comp. Sci. 2019. V.11661. P.300–314.
29. *Tarasov O. V.* // Theor. Math. Phys. 2019. V.200, No.2. P.1205–1221.
30. *Abgaryan V., Khvedelidze A., Torosyan A.* // J. Math. Sci. 2019. V.240. P.617–633.
31. *Gerdt V. P., Kotkova E. A., Vorob'ev V. V.* // Phys. Part. Nucl. Lett. 2019. V.16, No.6. P.975–984.
32. *Goncharov P., Ososkov G., Nechaevskiy A., Uzhinsky A., Nestsiarenia I.* // Stud. Comp. Intelligence. 2019. V.799. P.151–159; https://doi.org/10.1007/978-3-030-01328-8_16.
33. *Karamysheva T. et al.* // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. Sect. A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 2019. V.940. P.61–65.
34. *Belov S. D., Javadzade J. N., Kadochnikov I. S., Korenkov V. V., Zrellov P. V.* // CEUR Workshop Proc. 2019. V.2507. P.469–472.
35. *Бондяков А. и др.* // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2019. Т.15, №3. С.586–595.
36. *Lukyanov V. K., Kadrev D. N., Zemlyanaya E. V., Lukyanov K. V., Antonov A. N., Gaidarov M. K.* // Phys. Rev. C. 2019. V.100. P.034602.
37. *Chuluunbaatar O. et al.* // Phys. Rev. A. 2019. V.99. P.062711; <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.99.062711>.