



## ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2020 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 кооперации 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 2020 г. сотрудниками Лаборатории информационных технологий опубликовано свыше 170 научных работ, представлено более 120 докладов на международных и российских конференциях.

### ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ИНФРАСТРУКТУРА ОИЯИ

Основные направления деятельности ЛИТ в 2020 г. — развитие МИВК ОИЯИ [1] и обеспечение надежного функционирования сетевой инфраструктуры ОИЯИ, на которую в период пандемии легли дополнительные требования по обеспечению дистанционной работы сотрудников ОИЯИ. Развитие МИВК включало продолжение начатой в 2019 г. обширной модернизации систем охлаждения и энергообеспечения МИВК, модернизацию и развитие вычислительных ресурсов и систем хранения данных МИВК, развитие ИТ-инфраструктуры мегасайенс-проекта NISA, наращивание производительности грид-компонентов Tier-1 и Tier-2, наращивание облачного компонента и создание интегрированной облачной среды для экспериментов ОИЯИ, расширение гетерогенной вычислительной платформы HubyLIT, включающей суперкомпьютер (СК) «Говорун».

**Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ.** В 2020 г. обеспечивалось надежное функционирование телекоммуникационных каналов связи ОИЯИ: резервированного канала Москва–ОИЯИ с пропускной способностью  $3 \times 100$  Гбит/с, прямого канала связи ОИЯИ–ЦЕРН с пропускной способностью 100 Гбит/с и резервного канала 100 Гбит/с, проходящего через ММТС-9 в Москве и Амстердаме, обеспечивающих функционирование сети LHCOPN для связи центров Tier-0 (ЦЕРН) и Tier-1 (ОИЯИ), и внешней наложенной сети LHCONe, предназначенной для центра Tier-2 ОИЯИ; прямых каналов до 100 Гбит/с для связи по технологии RU-VRf с коллаборацией научных центров RUHEP и сетями Runnet, ReTN [2].

Распределение входящего и исходящего трафика по подразделениям ОИЯИ в 2020 г. (превышающее по входящему трафику 25 ТБ) приведено в таблице.

Подразделение	Входящий трафик, ТБ	Исходящий трафик, ТБ
Лаборатория ядерных проблем	425,84	271,81
Лаборатория физики высоких энергий	208,03	130,76
Лаборатория нейтронной физики	97,7	130,15
Лаборатория информационных технологий	93,26	87,99
Гостинично-ресторанный комплекс	87,04	27,71
Университет «Дубна»	86,97	51,16
Лаборатория ядерных реакций	81,98	70,52
Узел удаленного доступа	63,91	10,89
Управление	56,09	90,55
Учебно-научный центр	31,4	10,59
Лаборатория теоретической физики	24,39	27,85

Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего назначения, Tier-1, Tier-2 и вычислительный комплекс, СК «Говорун» и облачные вычисления, составил в 2020 г. 29,91 ПБ, общий исходящий — 36,94 ПБ. Основным является трафик с научно-образовательными сетями, составляющий 97% от общего.

**Локальная вычислительная сеть ОИЯИ (ЛВС).** В 2020 г. обеспечивалось отказоустойчивое функционирование опорной магистрали локальной вычислительной сети Института с пропускной способностью  $2 \times 100$  Гбит/с и распределенной вычислительной кластерной сети между площадками ЛЯП и ЛФВЭ емкостью 400 Гбит/с. Обеспечено двойное резервирование сети для повышения надежности оптической транспортной магистрали.

Продолжены работы по развитию и совершенствованию сетевых компонентов ИТ-инфраструктуры ОИЯИ. Сеть распределенного хранения EOS и сеть «Облачные вычисления» подключены к внешней сети RU-VRP/LHCONE. Ввод в эксплуатацию 4-го модуля в зале МИВК и его наполнение вычислительными ресурсами сопровождалось работами по настройке и подключению центральных и стоечных коммутаторов.

Для работы в режиме видеоконференций было протестировано несколько систем (Cisco Meeting Server, BigBlueButton, Videomost, Zoom и т. д.). Для массового использования была выбрана система Cisco Webex, на базе которой в 2020 г. было проведено 816 совещаний.

Продолжена модернизация кластера виртуальных сервисов сетевой службы ОИЯИ. Сетевой кластер NOC работает с виртуальными машинами, которые обеспечивают ключевые сервисы для всей сетевой инфраструктуры

ОИЯИ: DNS, DHCP, relays — промежуточные почтовые серверы, серверы сетевых баз данных, сервер Web-хостинга NOC, а также ряд сторонних сервисов для ЛИТ и УНЦ ОИЯИ.

Кластер состоит из 6 вычислительных узлов и 2 систем хранения данных. Системы хранения данных функционируют под управлением файловой системы ZFS. Кластер работает в режиме  $24 \times 365$ . Архитектурное решение обеспечивает организацию безостановочной работы при обновлениях как программного, так и аппаратного компонентов сетевого кластера.

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

ЛВС ОИЯИ содержит 8895 сетевых элементов и 16 884 IP-адреса, 7388 пользователей сети, 3192 пользователя сервиса mail.jinr.ru, 1419 пользователей электронных библиотек и 445 пользователей сервиса удаленного доступа.

#### **Инженерная инфраструктура МИВК.**

В 2020 г. продолжены работы по замене и совершенствованию инженерной инфраструктуры МИВК, предназначенной для обеспечения надежной, бесперебойной и отказоустойчивой работы информационно-вычислительных систем и ресурсов хранения данных. Введена в эксплуатацию система центрального бесперебойного и резервированного электропитания

для вычислительного зала МИВК на базе аккумуляторных источников и дизель-генераторных установок. Частично модернизирована система климат-контроля — комплекса взаимосвязанного оборудования различных схем воздушного и жидкостного охлаждения, создающего температурный режим для работы МИВК в режиме  $24 \times 365$ .

**Грид-среда ОИЯИ.** Грид-инфраструктура ОИЯИ представлена центром уровня Tier-1 для эксперимента CMS на LHC и центром уровня Tier-2 для обработки данных экспериментов ALICE, ATLAS, CMS, LHCb, BES, BIOMED, MPD, NOvA, STAR, ILC и др. Оба грид-сайта ОИЯИ обеспечивают 100%-ю доступность и надежность сервисов.

В 2020 г. система обработки данных Tier-1 была увеличена до 13 376 ядер, что обеспечи-

вает производительность 203,569 kHS06. Расширена система хранения, состоящая из дисковых массивов и долговременного хранилища данных на лентах. Общая полезная емкость дисковых серверов увеличена до 13,7 ПБ. В апреле завершилась работа по вводу в строй новой ленточной библиотеки IBM TS4500 общим объемом 40 ПБ. К настоящему времени система долговременного хранения данных состоит из библиотек IBM TS3500 и IBM TS4500 и ориентирована на обслуживание экспериментов NICA и CMS.

По производительности Tier-1 (T1\_RU\_JINR) занимает второе место среди других центров Tier-1 для эксперимента CMS в мире (рис. 1, а). В 2020 г. обработано более 294 млн событий, что составляет 25% от их общего числа (рис. 1, б) и 23% от общей загрузки

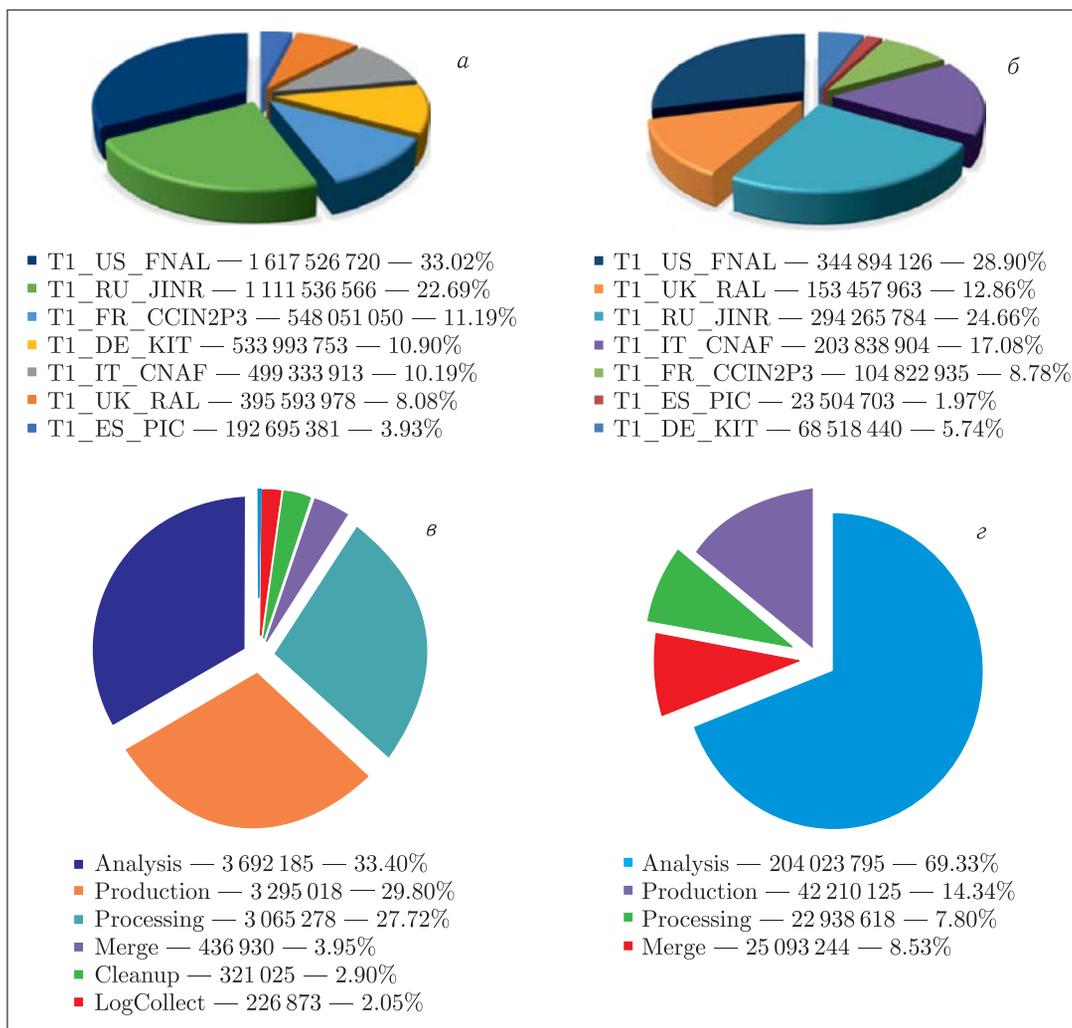


Рис. 1. Вклад мировых центров Tier-1 в обработку экспериментальных данных CMS за 2020 г.: а) распределение по нормированному времени ЦПУ в часах HS06; б) количество обработанных событий. Статистика использования центра Tier-1 ОИЯИ в эксперименте CMS по разным типам потоковой обработки данных за 2020 г.: в) распределение задач; г) распределение событий по типам обработки

ЦПУ всех центров Tier-1 для экспериментов CMS.

На рис. 1, в, г показано число задач и количество событий, обработанных в ОИЯИ в центре уровня Tier-1 CMS в 2020 г. по разным типам потоковой обработки данных (реконструкция, моделирование, повторная обработка, анализ и т. д.).

В 2020 г. на Tier-1 был осуществлен переход, связанный, с одной стороны, с окончанием поддержки программного обеспечения (ПО), используемого для вычислительных элементов (CREAM-CE), системы пакетной обработки заданий (Torque) и планировщика (Maui), и, с другой стороны, с тем, что старое ПО и системы не справлялись с повышенной нагрузкой и большим количеством счетных машин. Для замены CREAM-CE был выбран ARC-CE (Advanced Resource Connector-Computing Element), который широко используется в WLCG (Worldwide LHC Computing Grid). В качестве менеджера ресурсов выбран SLURM — высокомасштабируемый отказоустойчивый менеджер кластеров и планировщик заданий для больших кластеров с открытым кодом. Он позволяет осуществлять гибкое планирование с приоритетами, справедливое распределение ресурсов между разными пользователями и оптимизацию использования счетных ресурсов. SLURM также применяется на СК «Говорун».

Основными функциями Tier-1 являются обеспечение обмена данными со всеми мировыми сайтами, работающими на экспе-

римент CMS, и хранение необработанных экспериментальных и моделированных данных. В 2020 г. общий объем обмена данными с системой хранения на базе dCache с учетом локальных обменов составил 106 ПБ, из них записано 22 ПБ новых файлов. На рис. 2 приведена статистика обмена данными Tier-1 CMS ОИЯИ с другими грид-центрами с объемом больше 100 ТБ по исходящему трафику. 192 центра глобальной сети WLCG обработки данных экспериментов на LHC скачали 26 154,5 ТБ с системы хранения Tier-1, 130 из них передали 10 655,7 ТБ данных для записи.

Вычислительные ресурсы центра Tier-2 в 2020 г. были расширены до 7060 ядер, что в настоящее время обеспечивает производительность порядка 100 kH506. Общая полезная емкость дисковых серверов составляет 4763 ТБ для ATLAS, CMS и ALICE и 140 ТБ для других виртуальных организаций. Сайт ОИЯИ Tier-2 является лучшим в российском консорциуме «Российский грид для интенсивных операций с данными» (Russian Data Intensive Grid — RDIG). В 2020 г. 55% от общего суммарного времени ЦПУ, затраченного на обработку и анализ данных на ресурсах консорциума RDIG, было выполнено на сайте Tier-2 ОИЯИ (рис. 3, а). На рис. 3, б приведены данные по использованию сайта Tier-2 ОИЯИ виртуальными организациями в рамках грид-проектов в 2020 г.

МИВК обеспечивает проведение пользователями вычислений вне рамок грид-среды. Это необходимо как для некоторых экспериментов, так и для локальных пользователей из лабо-

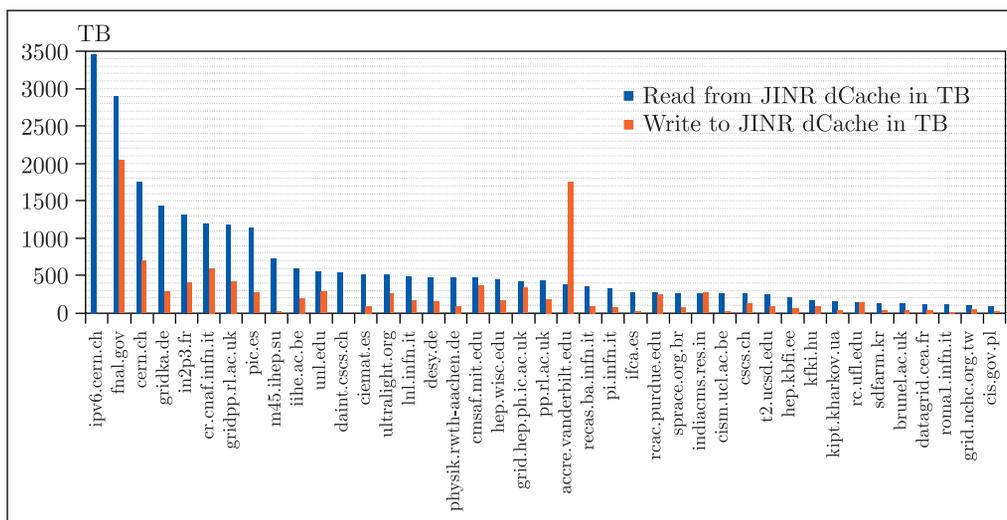


Рис. 2. Статистика обмена данными Tier-1 ОИЯИ с мировыми центрами обработки данных инфраструктуры WLCG через систему хранения данных на базе dCache: синий цвет — объем переданных данных с Tier-1 ОИЯИ в другие мировые центры Tier-1 и Tier-2; красный цвет — объем переданных данных с мировых центров Tier-1 и Tier-2 на Tier-1 ОИЯИ для записи и обработки

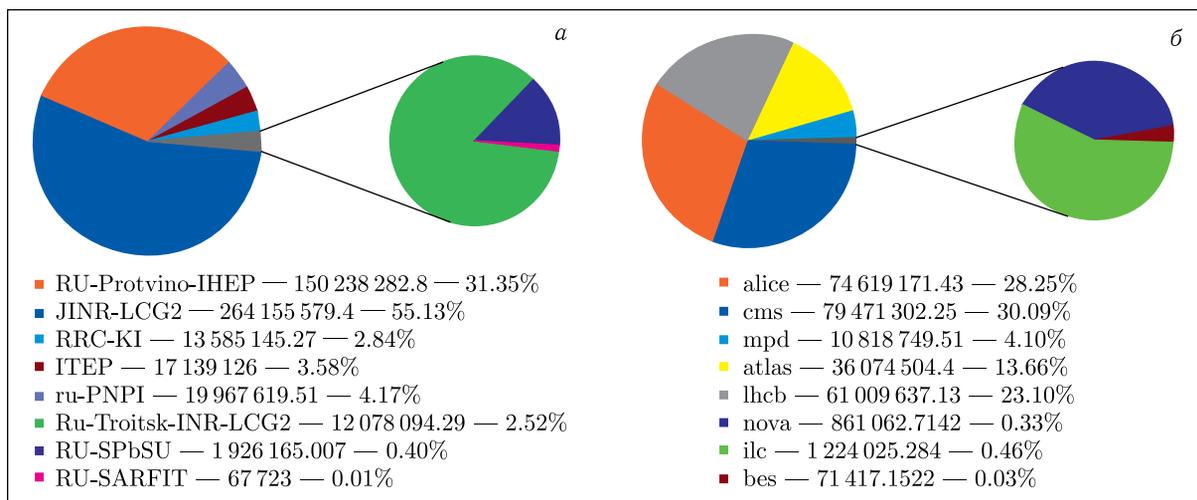


Рис. 3. Статистика работы Tier-2 ОИЯИ: а) распределение по времени ЦПУ по сайтам организаций, входящих в российский консорциум RDIG; б) использование сайта Tier-2 ОИЯИ виртуальными организациями глобальной грид-инфраструктуры (по нормированному времени ЦПУ в HS06 часах)

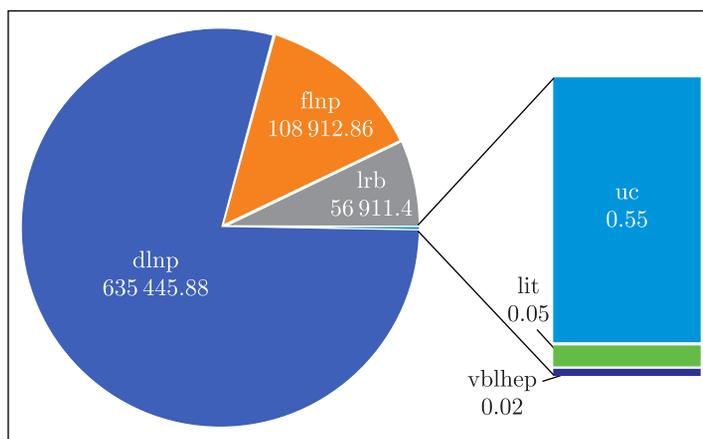


Рис. 4. Статистика использования вычислительного кластера: распределение по времени ЦПУ в часах, нормированных на 1000 Specint2000, по задачам, выполненным на локальном (не грид) вычислительном кластере подразделениями Института и группами пользователей

раторий ОИЯИ. Все вычислительные мощности доступны пользователям ОИЯИ и пользователям грид-среды через единую систему пакетной обработки заданий. На рис. 4 приведено распределение по времени заданий, выполненных на вычислительном кластере МИВК подразделениями Института и группами пользователей.

В 2020 г. была расширена система хранения данных на базе ПО EOS. В настоящее время для пользователей EOS доступно 7,12 ПБ дискового пространства. Основными пользователями являются Baikal-GVD, DANSS, FOBOS, JUNO, VM@N, MPD, SPD, PANDA.

Стабильная и эффективная работа Tier-1, Tier-2, систем хранения и необходимый уро-

вень кибербезопасности кластеров обеспечивались систематическим обновлением микропрограммного обеспечения компонентов серверов, версии ядра операционной системы, микропрограммного обеспечения сервисных модулей серверов IDRAC/IPMI.

**Облачная среда.** В 2020 г. ресурсы облачной инфраструктуры были расширены за счет вклада эксперимента NOvA (480 ядер ЦПУ, 2,88 ТБ ОЗУ, 1,728 ПБ дискового пространства для хранилища на базе serph) и ввода в эксплуатацию 2880 ядер ЦПУ с 46,08 ТБ ОЗУ, приобретенных для эксперимента JUNO. Общее количество ресурсов, размещенных в облачной инфраструктуре ОИЯИ, составляет 5000 ядер ЦПУ, 60 ТБ ОЗУ и 3,1 ПБ сырого дискового пространства в serph-хранилище.

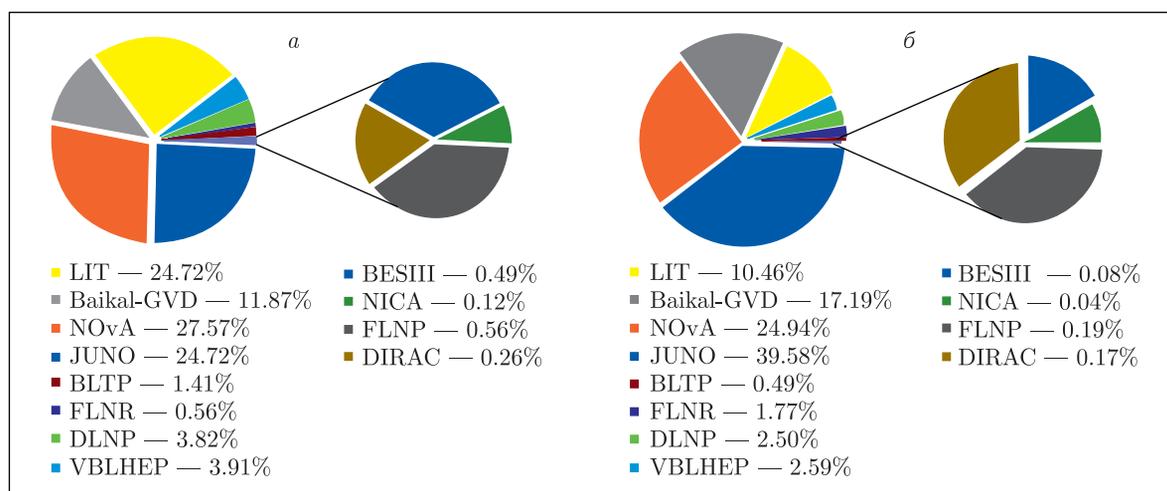


Рис. 5. Потребление ресурсов облачной инфраструктуры ОИЯИ за 2020 г.: а) время ЦПУ; б) использование ОЗУ

На рис. 5 представлена информация по потреблению ресурсов облачной инфраструктуры за 2020 г.

Облако ОИЯИ является одним из участников распределенной информационно-вычислительной среды (РИВС) на базе ресурсов ОИЯИ и организаций из стран-участниц Института. В 2020 г. в Северо-Осетинском государственном университете им. К. Л. Хетагурова, в Софийском университете им. Св. Климента Охридского и Институте ядерных исследований и ядерной энергии Болгарской АН были развернуты и подключены к РИВС облачные инфраструктуры. Начаты работы по разворачиванию облачных

инфраструктур в Грузинском техническом университете и Египетской национальной сети научно-технической информации Академии научных исследований и технологий.

В 2020 г. к использованию вычислительных мощностей РИВС подключился эксперимент Baikal-GVD. Круговая диаграмма с количеством успешно выполненных в 2020 г. задач на ресурсах всех участников РИВС пользователями всех виртуальных организаций представлена на рис. 6.

Свободные от основной деятельности ресурсы РИВС в 2020 г. были задействованы для проведения исследований по изучению вируса SARS-CoV-2 в рамках платформы

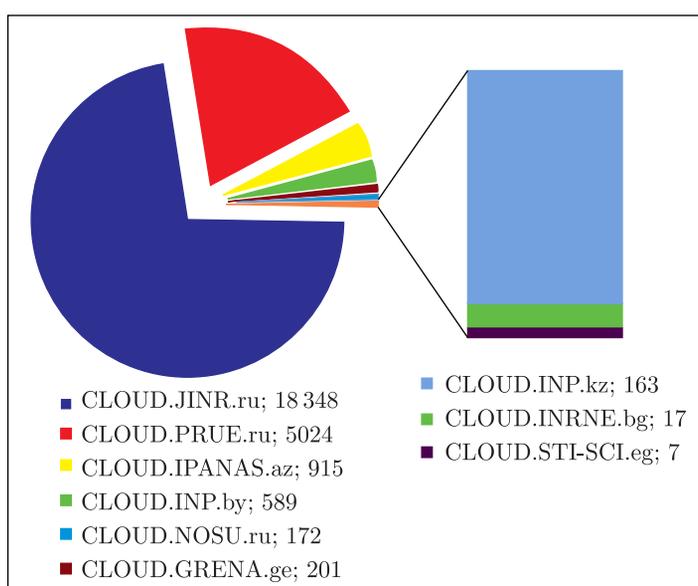


Рис. 6. Распределение количества задач, успешно выполненных в 2020 г. пользователями всех виртуальных организаций на облачных ресурсах организаций стран-участниц ОИЯИ

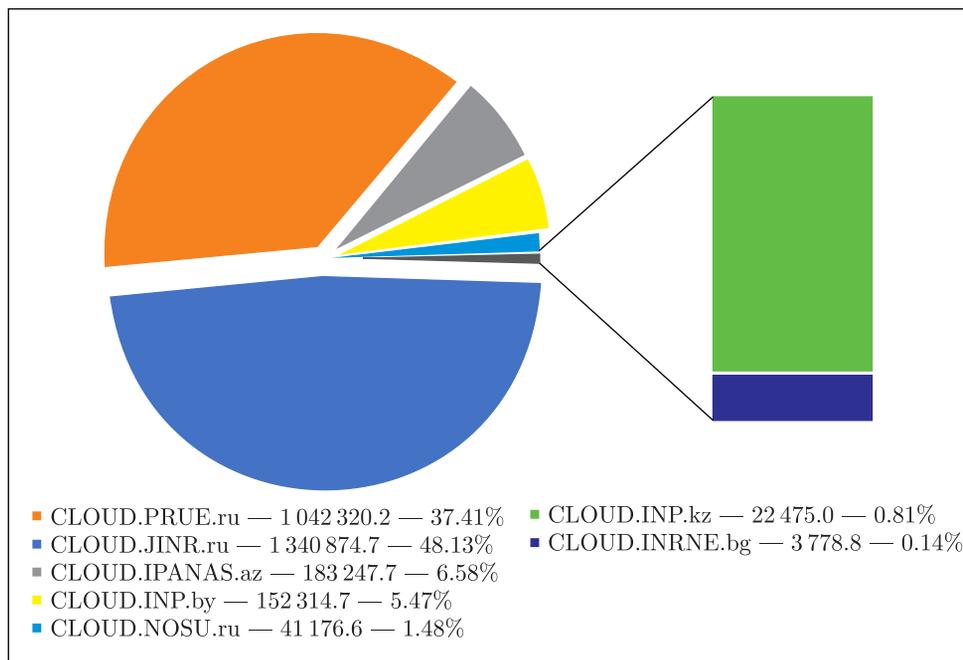


Рис. 7. Распределение вкладов участников РИВС в исследование вируса SARS-CoV-2 посредством платформы Folding@Home в ЦПУ HS06 часах

Folding@Home. На рис. 7 представлена круговая диаграмма, отображающая вклад каждого из ресурсных центров РИВС.

**Гетерогенная инфраструктура.** Гетерогенная инфраструктура МИВК ОИЯИ представлена компонентом HybriLIT, состоящим из учебно-тестового полигона и СК «Говорун», объединенных единой программно-информационной средой. В 2020 г. были завершены разработка и внедрение в эту среду экосистемы для машинного/глубокого обучения и высокопроизводительных вычислений (экосистемы ML/DL/HPC), которая активно используется для создания алгоритмов на базе нейросетевых подходов для решения прикладных задач.

За 2020 г. в среду HybriLIT были внедрены и поддерживались по требованию групп пользователей актуальные версии свыше 20 программных пакетов, в частности: GSL (ЛТФ); FairSoft, FairRoot, PyROOT с надстройками для BmnRoot и MpdRoot, SMASH, Valgrind (NICA); ABINIT, Wien2k, Amber, AmberTools (ЛНФ); DIRAC, ELPA, FLUKA, LAMMPS (ЛЯР); FreeSurfer, FSL, MRIConvert, GROMACS (ЛРБ); expect, FORM, SMILEI (ЛИТ) и др.

С целью повышения эффективности решения задач пользователей, использования вычислительных ресурсов и ресурсов хранения данных на СК «Говорун» в 2020 г. разработан и реализован подход к управлению вычисли-

тельными ресурсами и ресурсами хранения данных — «оркестрация ресурсов» [3]. Под этим термином подразумевается программная дезинтеграция вычислительного узла, т. е. отделение вычислительных ядер и элементов хранения данных (SSD-дисков) с последующим их объединением в соответствии с требованиями задачи пользователя. Таким образом, вычислительные элементы (CPU-ядра и графические ускорители) и элементы хранения данных (SSD-диски) образуют независимые поля. Благодаря оркестрации пользователь может под свою задачу аллоцировать необходимое число и тип вычислительных узлов (в том числе необходимое число графических ускорителей), необходимый объем и тип систем хранения данных. После завершения задачи вычислительные ядра и элементы хранения возвращаются в соответствующие поля и готовы к следующему использованию. Это свойство позволяет эффективно решать пользовательские задачи разных типов, повысить уровень конфиденциальности работы с данными, избежать системных ошибок, возникающих при пересечении ресурсов для различных пользовательских задач.

В течение 2020 г. всеми группами пользователей, применяющих ресурсы СК «Говорун» для решения задач в рамках 25 тем Проблемно-тематического плана ОИЯИ, было выполнено 491 609 задач на всех вычислительных компонентах, при этом большая часть из

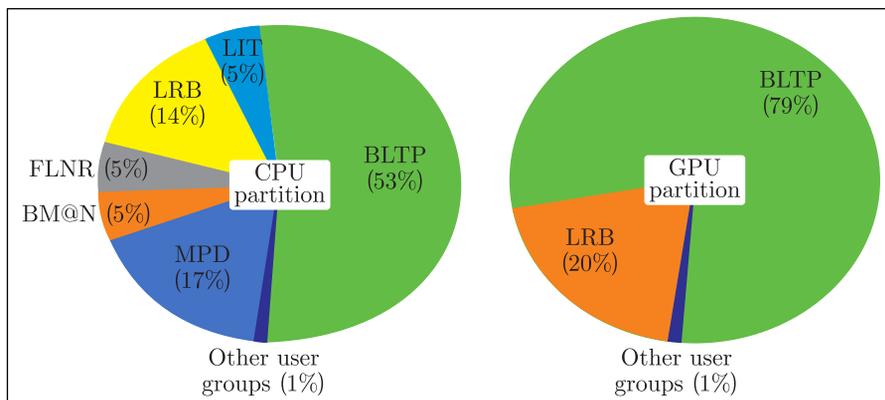


Рис. 8. Распределение ресурсов СК «Говорун» по группам пользователей

них, 440 813, — на компоненте Cascade. На компонентах KNL и DGX — 45 411 и 5385 соответственно. В целом за 2020 г. на компоненте Cascade было наработано свыше 35 млн ядро-часов (core-hours). Средняя загрузка по вычислительным компонентам в 2020 г. составила: Cascade — 95,7%, KNL — 89,3%, DGX — 94,1%.

Общее количество пользователей СК «Говорун» в настоящее время составляет 157, из них 118 — из лабораторий ОИЯИ, 39 — из других организаций стран-участниц ОИЯИ. При этом за 2020 г. были зарегистрированы 75 новых пользователей. Распределение вычислительных ресурсов между группами пользователей показано на рис. 8.

Основными пользователями CPU-компонента суперкомпьютера являются пользователи из ЛТФ и мегапроекта NICA, суммарно 75%. Пользовательские группы из других лабораторий задействуют четверть ресурсов. Наряду с этим для GPU-компонента порядка 80% ресурсов СК «Говорун» потребляется пользователями из ЛТФ, 20% — из ЛРБ, что связано с внедрением нейросетевых подходов для задач радиобиологии.

Пользователями платформы за 2020 г. было опубликовано 65 статей. Сводный отчет сформирован и размещен на сайте [http://hlit.jinr.ru/users\\_publications/](http://hlit.jinr.ru/users_publications/).

В 2020 г. продолжены работы по развитию off-line компьютерного комплекса для моделирования, обработки, анализа и хранения данных проекта NICA, развернутого на базе МИВК ОИЯИ как распределенный масштабируемый гибридный кластер, что позволяет эффективно и без дополнительных трудозатрат организовать компьютинг для проекта NICA по требованию различного класса задач и пользователей. Важным моментом в создании такой инфраструктуры является интегра-

ция распределенных вычислительных ресурсов. Одним из вариантов связующего промежуточного ПО является DIRAC Interware — продукт для интеграции гетерогенных вычислительных ресурсов и ресурсов хранения данных в единую платформу, основанный на использовании стандартных протоколов доступа к данным (xRootD, GridFTP и др.) и пилотных задач. На конец 2020 г. в DIRAC были интегрированы все компоненты МИВК, облака стран-участниц ОИЯИ, а также кластер Национального автономного университета Мексики (НАУМ) в рамках сотрудничества по проекту MPD.

С использованием интеграции через DIRAC удалось задействовать наибольшее количество вычислительных ресурсов для централизованной генерации данных методом Монте-Карло для эксперимента MPD. В вычислениях участвовали СК «Говорун», кластеры Tier-1/Tier-2, кластер NICA и кластер НАУМ. Успешно выполнены более 500 000 задач. Объем сгенерированных данных превысил 130 ТБ. Все данные зарегистрированы в файловом каталоге DIRAC и сохранены в системе хранения EOS. На рис. 9 приведена статистика по нормированному времени ЦПУ в HS06 часах, использованному на задачи моделирования для MPD на вычислительных ресурсах, интегрированных в рамках DIRAC.

Разработан программный комплекс, позволяющий моделировать распределенную вычислительную систему для сбора, хранения и обработки данных эксперимента BM@N проекта NICA при разных сценариях запуска задач для следующего сеанса, планируемого к проведению в 2021 г. Целью моделирования стало оптимальное распределение потоков задач первичной обработки данных эксперимента BM@N на вычислительные узлы для минимизации простоев оборудования в процессе

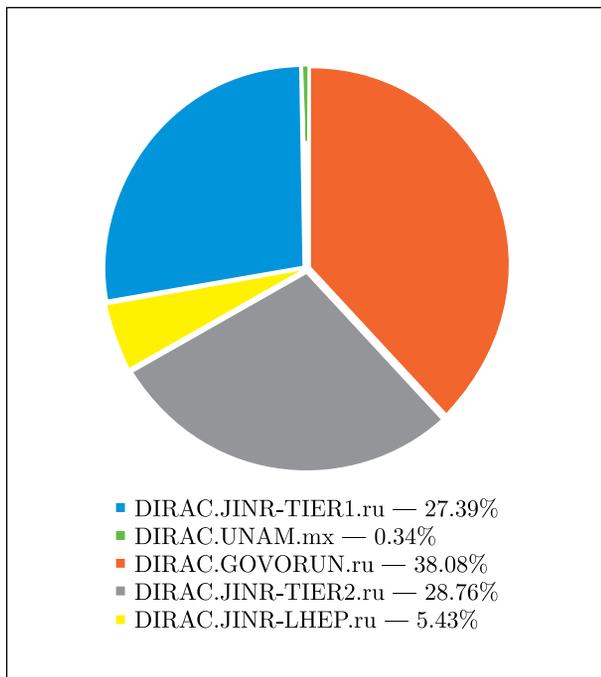


Рис. 9. Статистика по нормированному времени ЦПУ в HS06 часах, использованному на задачи моделирования для MPD на вычислительных ресурсах, интегрированных в рамках DIRAC

выполнения заданий. На основании результатов моделирования можно предсказать загрузку вычислительных узлов и каналов связи.

**Система мониторинга.** Разработанная комплексная система мониторинга МИВК позволяет получать информацию от различных компонентов вычислительного комплекса: инженерной инфраструктуры, сети, вычислительных узлов, систем запуска задач, элементов хранения данных, грид-сервисов, что гарантирует высокий уровень надежности МИВК. В 2020 г. к общей системе мониторинга была подключена облачная инфраструктура. Система мониторинга Litmon является модульной и распределенной, поэтому добавление новых узлов требует установки нового узла распределения нагрузки системы мониторинга. На сегодня в систему мониторинга включены 4 сервера [4]: управляющий сервер litmon-01, а также 3 сервера распределения нагрузки (рис. 10).

Выполнен ряд работ по развитию и текущему сопровождению системы электронного документооборота (СЭД) «Дубна». В частности, разработаны модуль ведения плана закупок, подсистема автоматизированного формирования договоров поставки на основе типовых форм, модуль мониторинга и архивного электронного хранения и поиска договоров поставки, реализована возможность подписания

счетов на оплату с использованием усиленной электронной подписи.

Осуществлялось текущее сопровождение и развитие системы управления проектом АРТ EVM для NICA. В частности, реализована интеграция данных Cost Book с планом закупок в СЭД «Дубна».

Разработана и запущена в эксплуатацию новая версия информационной системы CERN DB для регистрации командировок в ЦЕРН, размещения командированных по местам проживания и учета финансовых расходов.

Осуществлялось текущее сопровождение и развитие по запросам пользователей информационных систем HR LHEP, ADB2, PIN, ИСС, базы документов, электронного фотоархива.

В 2020 г. был разработан и запущен в эксплуатацию личный кабинет с возможностью онлайн-оплаты для нанимателей жилищного фонда Института. Совместно с системой электронного документооборота создана система обработки счетов в электронном виде, для подписания которых внедрен внутренний удостоверяющий центр. В кадровой системе создана подсистема учета электронных трудовых книжек, полностью переработана система специальной оценки рабочих мест.

Усовершенствована управленческая отчетность Института, в рамках развития проектного управления разработан соответствующий модуль в программе 1С, позволяющий отслеживать ход исполнения работ, рисовать диаграмму Ганта, назначать финансовые ресурсы.

Продолжались работы по текущему обучению и поддержке пользователей, сопровождению и модернизации программ 1С. Начаты работы по созданию системы учета путевок в пансионат «Дубна», совместно с другими службами была протестирована и отработана новая методика бухгалтерского учета в пансионате.

В 2020 г. осуществлялось сопровождение информационной системы научной аттестации ОИЯИ (<https://dissertations.jinr.ru>), портала «Визит-центра» (<https://visitcentre.jinr.ru/>), продолжились работы по модернизации и сопровождению веб-сайта журналов «ЭЧАЯ» и «Письма в ЭЧАЯ» (<http://peran.jinr.ru>). Продолжены традиционные разработка, создание и поддержка веб-сайтов конференций, симпозиумов по заявкам лабораторий и других подразделений ОИЯИ.

Традиционно осуществлялось сопровождение серверов и систем общего использования: инфраструктуры хостинга сайтов ([www.jinr.ru](http://www.jinr.ru), [flnph.jinr.ru](http://flnph.jinr.ru), [flerovlab.jinr.ru](http://flerovlab.jinr.ru), [micc.jinr.ru](http://micc.jinr.ru), [mpdroot.jinr.ru](http://mpdroot.jinr.ru) и т. д.), инфра-

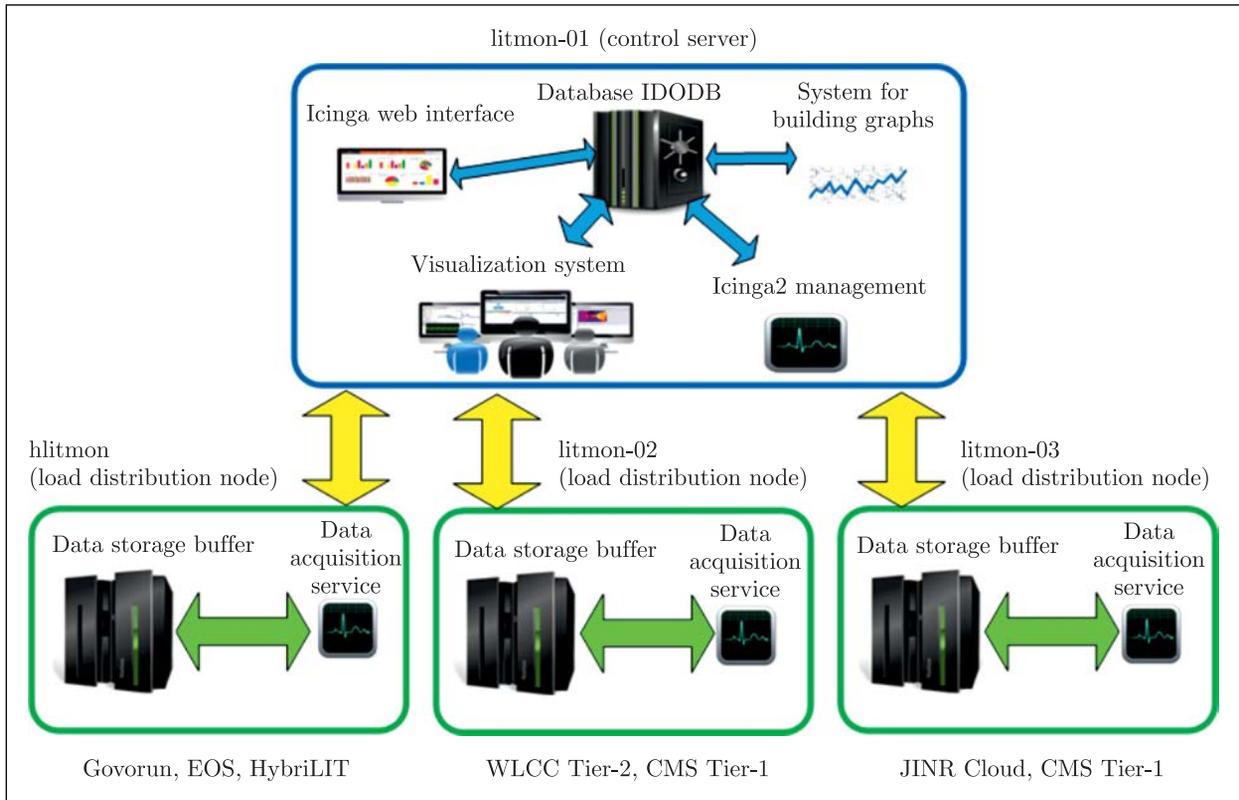


Рис. 10. Структурная схема системы мониторинга Litmon

структуры серверов административного назначения (ресурсы [pin.jinr.ru](http://pin.jinr.ru), [adb2.jinr.ru](http://adb2.jinr.ru), [sed.jinr.ru](http://sed.jinr.ru) и т. п.), сервисов [pm.jinr.ru](http://pm.jinr.ru) (система

автоматизированного управления проектами) и [disk.jinr.ru](http://disk.jinr.ru) (сервис облачного хранилища для сотрудников ОИЯИ).

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

Одним из направлений деятельности ЛИТ является обеспечение математической, алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. Ниже приведена краткая информация о полученных результатах.

Развернут прототип платформы для аналитики потоковых данных с использованием технологий больших данных [5]. Платформа протестирована на примере исследования сетевого трафика в распределенной сети.

Разработаны геометрическая и программная модели для различных конфигураций внутренней трековой системы эксперимента  $BM@N$ , состоящей из координатных детекторов GEM, Forward Silicon и STS-детекторов. Реализованы алгоритмы реалистичного моделирования прохождения заряженных частиц через чувствительные плоскости детекторов трековой системы. Произведен рас-

чет необходимых характеристик газовой смеси, планируемой к использованию в качестве рабочей среды в газонаполненных камерах GEM-детектора для будущих конфигураций в 2021–2022 гг.

Разработан программный модуль для моделирования реконструкции данных в дрейфовых камерах (ДК) эксперимента  $BM@N$ . Получено необходимое сходство работы реконструкции модельных и экспериментальных данных. Программное обеспечение имплементировано в пакет программ  $BMNROOT$ . Цепочка реконструкции ДК была унифицирована и автоматизирована для обработки всех типов данных эксперимента  $BM@N$ .

Нейросетевые модели  $RDGraphNet$  и  $TrackNETv2$ , разработанные для эксперимента  $BM@N$  с фиксированной мишенью, успешно адаптированы для цилиндрического детектора  $CGEM$  коллайдерного эксперимента

BESIII (ИФВЭ, Пекин). Обучение на модельных данных и последующее тестирование модели RDGraphNet показали обнадеживающие результаты — полнота 98% и точность 86%, для TrackNETv2 — полнота 99% и точность 77% [6].

Проведено дальнейшее расширение генератора Монте-Карло столкновений тяжелых ионов DCM-SMM, используемого для моделирования десятков миллионов событий для VM@N и MPD (NICA) на кластере HybriLIT [7].

Проведено исследование влияния изменения параметров в трех адронных моделях GEANT4 на согласование с наборами данных для тонких мишеней; с использованием фреймворка Professor для настройки моделей описано соответствие этим наборам данных [8]. Обнаружено, что при изменении параметров наборы данных согласуются значительно лучше, но для полного согласования требуется больше степеней свободы.

Создан тест-сервер для разрабатываемой новой версии системы EventIndex в рамках развития проекта для подготовки к Run 3 эксперимента ATLAS. Реализованы сервисы подсчета матрицы пересечений триггерных цепочек. Начаты работы по созданию нового сервиса Event Picking Service в рамках проекта ATLAS EventIndex. Произведена адаптация системы операционного мониторинга системы TDAQ под новые версии продукта Grafana. Проведена модернизация сервиса визуализации данных для системы мониторинга сетевого трафика в ATLAS (NETIS).

Моделирование магнитных полей включало интенсивные исследования, касающиеся трехмерного компьютерного моделирования магнитных систем в рамках проекта NICA по проверке однородности магнитного поля в рабочих областях новых физических магнитов, а также совершенствование средств проектирования новых циклотронов медицинского назначения, рассчитанных на суперкомпьютере «Говорун».

В 2020 г. библиотека JINRLIB дополнена программами, разработанными сотрудниками ЛИТ для общего пользования: EORP 2020 — программа расчета замкнутых равновесных орбит (<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/eorp/index.html>), Split — параллельная реализация численного решения системы алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей с использованием алгоритма разбиений и технологии MPI (<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/split/index.html>), SIR-model — простейшая модель

эпидемического процесса (<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sir-model/index.html>). Обновлена программа SAS — программа для первичной обработки спектров малоуглового рассеяния (<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/sas/index.html>).

В сотрудничестве с ОИВТ РАН сформулирована модель, описывающая прохождение многокомпонентной газоконденсатной смеси через пористую среду в режиме истощения [9]. Получено количественное согласие численных результатов с экспериментальными данными по динамике извлекаемости углеродородов в зависимости от давления. Параллельная реализация алгоритма обеспечивает шестикратное ускорение вычислений при расчетах на кластере HybriLIT.

Исследовано влияние неупругого канала и выбора модели плотности распределения нуклонов в ядрах  $^{12,14}\text{Be}$  на согласие с экспериментальными данными [10]. Для плотности ядер  $^{12,14}\text{Be}$  в форме симметризованной ферми-функции получены параметры, улучшающие согласие дифференциальных сечений рассеяния  $^{12,14}\text{Be} + ^{12}\text{C}$  с экспериментальными данными. Расчеты выполнены на кластере HybriLIT.

Предложена, реализована и протестирована гибридная модель MPI + OpenMP для распараллеливания метода рядов Тейлора множественной точности [11]. С помощью данной модели рассчитана траектория аттрактора Лоренца на достаточно большом временном интервале [0, 7000].

С целью изучения сильно взаимодействующей ядерной материи, в частности в ядрах нейтронных звезд, методом байесовского анализа исследована расширенная модель сигма-омега. Найдены наиболее вероятные значения физических параметров модели по современным астрофизическим данным многоканальной астрономии [12].

Сформулирована задача Лагранжа о нахождении всех приближенных решений задачи трех тел на плоскости, при которых расстояния между телами остаются постоянными. Доказаны две теоремы, сводящие эту проблему к изучению свойств схемы средней точки для системы связанных осцилляторов [13]. Показано, что в случае, когда тела образуют правильный треугольник, приближенное решение наследует свойство периодичности точного решения Лагранжа.

Проанализирована проблема квантовомеханического описания околосварьерного слияния тяжелых ядер, происходящего в условиях сильной связи их относительного дви-

жения с поверхностными колебаниями [14]. С этой целью предложен эффективный метод конечных элементов для численного решения системы связанных уравнений Шредингера с граничными условиями, соответствующими полному поглощению. Установлено, что можно воспроизвести экспериментальные данные с помощью потенциала Вудса–Саксона без введения отталкивающих ядер. Показано, что сечения слияния при глубоких суббарьерных энергиях чувствительны к профилю потенциального кармана.

Выполнено моделирование процессов взаимодействия импульсных пучков ионов с металлическими мишенями с помощью метода молекулярной динамики [15]. При использовании усредненных значений параметров ионных пучков выполнено численное исследование зависимости от них динамики тепловых и структурных процессов в облучаемых мишенях при изменении размеров и неоднородностей структуры.

Получены основные параметры и волновые функции, определяющие структуру и свойства легких ядер с  $A = 6$  ( ${}^6\text{Li}$  и  ${}^6\text{He}$ ) в кластерной модели ядра  $\alpha + NN$ , учитывающей дибарионные резонансы в нуклон-нуклонном взаимодействии [16].

С помощью неприводимых представлений точечной группы  $D_{3h}$ , которая характеризует симметрию плоской равносторонней треугольной молекулы  $\text{H}_3^+$ , построена исходная трехцентровая волновая функция [17]. Результаты этой работы и реализация вычислительных методов открывают путь к дальнейшим исследованиям сложных трехцентровых систем.

Проведено численное моделирование лазерной абляции материала под действием ультракоротких лазерных импульсов. Получены зависимости максимума температуры на поверхности образца и толщины слоя абляции от дозы излучения падающего лазерного импульса. Численные расчеты проведены с применением метода конечных разностей [18].

Предложен и численно исследован метод сверхбыстрого переключения поляризации в сегнетоэлектриках с использованием эффекта самоускорения динамики поляризации через поле обратной связи [19].

Предложен новый алгоритм для представления полиномов в задачах вычисления инволютивных базисов и базисов Грёбнера систем нелинейных полиномиальных уравнений [20]. Новый подход позволяет передать часть этой вычислительной задачи на GPU, что открывает перспективы решения более сложных проблем.

Найдены параметры на классе сопряженности в группе Ли  $SL(n)$  и параметры на коприсоединенной орбите в пространстве  $sl^*(n)$ , двойственном к алгебре Ли. Таким образом, были решены задачи тривиализации слоений группы  $SL(n)$  и пространства  $sl^*(n)$  [21].

Проведены трехпетлевые расчеты ренормгрупповой функции  $\gamma_m$ , определяющей поведение эффективной массы фермионов в калибровочных теориях [22]. Использованы размерная регуляризация и схема минимальных вычитаний 't Хофта. Получены значения аномальных размерностей фермионов для квантовой хромодинамики и электродинамики.

Разработан новый универсальный символьно-численный алгоритм, который реализован как первая версия кода  $O(5) \times SU(1,1)$  в Wolfram Mathematica для вычисления ортонормированного базиса коллективной модели Бора–Моттельсона и который может быть реализован в любой системе компьютерной алгебры [23]. Такой базис широко используется для расчета спектров и электромагнитных переходов в твердой, молекулярной и ядерной физике.

Разработаны алгоритмы для проверки линейризуемости нелинейных (обыкновенных) дифференциальных уравнений. Первый алгоритм основан на построении алгебры точечной симметрии Ли и вычислении производной алгебры, во втором алгоритме используется дифференциальное разложение Томаса, что позволяет не только проверять линейризуемость, но и генерировать систему нелинейных частных дифференциальных уравнений, определяющих точечное преобразование, и коэффициенты линейризованного уравнения [24].

В рамках конструктивной квантовой механики исследована задача возникновения геометрии из запутанности в сложных квантовых системах. Показано, что вторая энтропия запутанности Реньи может быть полезна при применении полиномиальной компьютерной алгебры для моделирования метрических структур в квантовых системах с геометрией [25].

С использованием свойства отрицательности функции Вигнера введена глобальная мера неклассичности пространства состояний  $N$ -уровневой системы в распределении Гильберта–Шмидта, и дается ее оценка для  $N \rightarrow \infty$  [26].

Изучена зависимость глобального индикатора классичности от геометрии пространства квантовых состояний для полного семейства представлений вигнеровских квазиве-

роятностных распределений на примере ансамблей Гильберта–Шмидта, Буреша и Боголюбова–Кубо–Мори для кубитов и кутритов [27].

В рамках каналов квантовой декогеренции исследована устойчивость сцепления в двух кубитах с максимально запутанными смешанными состояниями [28].

Реализован алгоритм квантовой телепортации двухкубитных максимально запутанных

состояний Белла на разных пятикубитных квантовых процессорах. С целью уменьшения возникающих ошибок предложены несколько модификаций исходного протокола телепортации. Сравнение динамики результатов измерения выходных вероятностей, выполненных на процессоре IBM Q Yorktown, показывает прогресс в улучшении характеристик квантового оборудования IBM [29].

## НАУЧНО-ПРИКЛАДНЫЕ РАБОТЫ

Рассмотрены две задачи распознавания изображений: определение болезней по 25 классам пяти различных культур (винограда, хлопка, пшеницы, огурцов и кукурузы — всего 935 изображений) и определение типов мхов (5 типов, 599 изображений). Предложена нейросетевая архитектура, основанная на сиамской сети с трехчленной функцией потерь, в которой используется MobileNetV2 в качестве базовой сети. Данная модель показала выдающиеся результаты по точности для обеих задач. Средняя точность при определении болезни растений составила 97,8%, при классификации мхов — 97,6% [30]. Полученные результаты демонстрируют отличный потенциал подобного подхода при решении задач распознавания изображений в условиях малой обучающей выборки.

В рамках совместного проекта ЛИТ и ЛРБ в 2020 г. на базе экосистемы ML/DL/HPC платформы HybridLIT была разработана информационная система (ИС) для задач радиацион-

ной биологии, предназначенная для хранения экспериментальных данных и анализа изменений в центральной нервной системе млекопитающих на основе молекулярных, патоморфологических и поведенческих изменений в головном мозге млекопитающих при воздействии ионизирующих излучений и других факторов (рис. 11). В разработанную систему внедрены алгоритмы обработки экспериментальных данных на основе методов машинного и глубокого обучения. В ИС входят надежные современные средства аутентификации и иерархического разграничения доступа к данным, система хранения данных, а также компоненты удобной работы и визуализации результатов анализа данных [31].

Разработана геометрическая информационная система с возможностью конфигурирования при развертывании для использования во всех экспериментах проекта NICA. Спроектированы общая объектная модель и архитектура геометрической базы данных (БД).

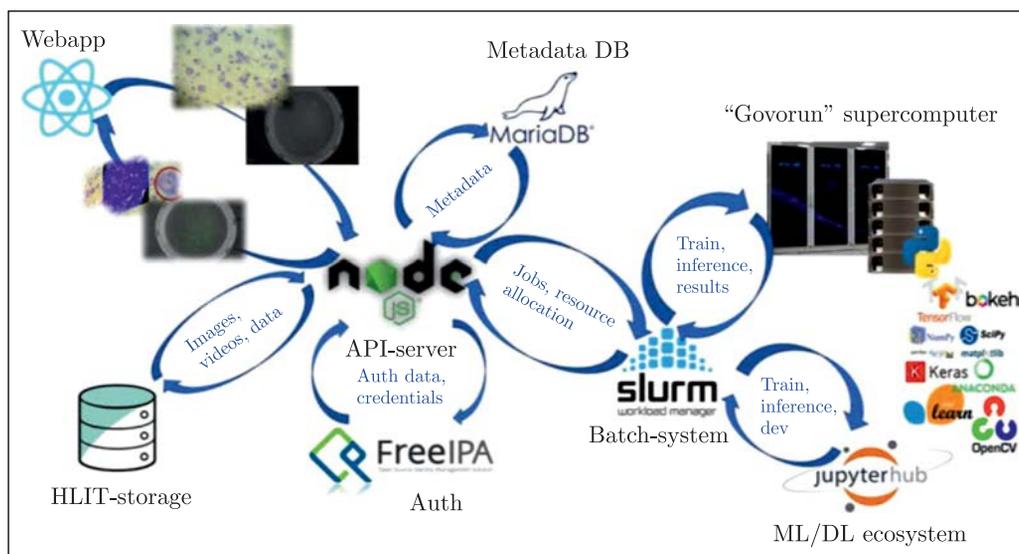


Рис. 11. Архитектура информационной системы для задач радиационной биологии

ИС включает в себя центральную (на основе СУБД PostgreSQL) и локальную (реплику на СУБД SQLite) геометрические базы данных. Центральная БД доступна на веб-сервере Apache и обеспечивает все функции, необходимые для управления геометрией детекторов. Локальная база данных, являясь частью программного обеспечения экспери-

ментов проекта NICA на базе среды ROOT, используется преимущественно для загрузки геометрии детекторов в задачах моделирования, реконструкции и физического анализа данных. Разработаны общие для всех экспериментов на NICA прикладной программный и веб-интерфейсы.

## МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В рамках соглашения о сотрудничестве между ОИЯИ и DESY, совместно с партнерами проекта JOIN<sup>2</sup> (Just anOther INvenio Instance, <https://join2-wiki.gsi.de/cgi-bin/view>) в 2020 г. продолжены работы по развитию информационной системы JINR Document Server на базе программной платформы JOIN<sup>2</sup> (<https://lt-jds-join2.jinr.ru/>), в том числе загрузка и верификация библиографических записей, загрузка и обновление следующих справочников: «Проблемно-тематический план», «Персоналии», «Подразделения», «Эксперименты», «Гранты». Это позволяет связывать публикации с соответствующими источниками финансирования, экспериментами с участием ОИЯИ и т. д. Реализована авторизация пользователей на базе технологии единого входа (Single Sign-On) для сотрудников ОИЯИ [32].

В рамках международного сотрудничества исследовательской группой, в которой участвовали представители ЛИТ (О. Чулуунбаатар) и ЛТФ (Ю. В. Попов), проведено кинематически полное экспериментальное измере-

ние характеристик комптоновского рассеяния на свободных атомах с помощью высокоэффективного метода ионной импульсной спектроскопии с холодной мишенью (Cold Target Recoil Ion Momentum Spectroscopy, COLTRIMS). Теоретическое описание данного явления базируется на расчетах, проведенных на СК «Говорун» [33].

Совместно с коллегами из Польши проведено исследование пика в отношении  $K^+/\pi^+$  при энергиях столкновения  $\sim 8$  ГэВ в рамках  $2 + 1$  модели Намбу–Иона–Лазинио с петлей Полякова. Параллельно рассматривались приближение среднего поля (Брейта–Вигнера) и подход Бета–Уленбека для описания взаимодействия связанных состояний в плотной и горячей среде [34]. Показано, что наилучшее соответствие с экспериментальными данными получается в случае, когда при расчетах берется неравновесный химический потенциал пионов, а отсутствие критической конечной точки на фазовой диаграмме не имеет критического влияния на положение и величину пика.

## ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА НА УЧЕБНО-ТЕСТОВОМ ПОЛИГОНЕ

Не менее важным аспектом деятельности, в которой задействованы ресурсы платформы HUBriLIT, является образовательное направление, связанное с проведением учебных курсов для сотрудников ОИЯИ и практических занятий для студентов государственного университета «Дубна», Тверского государственного университета и др. В 2020 г. проведены в удаленном формате учебные курсы и мастер-классы для студентов из Чехии и Армении.

В 2020 г. для более чем 1000 студентов проводились практические занятия на платформе HUBriLIT по курсам «Архитектуры вычислительных систем», «Технологии высокопроизводительных вычислений», «Современные методы анализа сложных систем», «Машинное обучение и интеллектуальный

анализ данных», «Языки и технологии анализа данных», «Математический аппарат и инструментарий анализа данных» с использованием экосистемы для ML/DL/HPC, что позволяет студентам осваивать самые современные технологии разработки параллельных алгоритмов на новейших вычислительных гибридных архитектурах и инструментарий (библиотеки и фреймворки) для задач машинного и глубокого обучения [35]. Помимо этого ресурсы платформы активно использовались для подготовки ИТ-специалистов в рамках Международной школы по информационным технологиям «Аналитика больших данных» [36], студенты которой задействованы в реальных научных проектах ОИЯИ (результаты представлены в сборнике отчет-

тов научно-проектной деятельности школы: [http://itschool.jinr.ru/other/Reports\\_ITSchool\\_russian.pdf](http://itschool.jinr.ru/other/Reports_ITSchool_russian.pdf)). С использованием ресурсов плат-

формы HybriLIT за 2020 г. подготовлены три кандидатских диссертации и 15 магистерских диссертаций и бакалаврских работ.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кореньков В.В. // ЯФ. 2020. Т. 83, № 6. С. 534–538;  
*Korenkov V.* // 2020 Intern. Sci. and Techn. Conf. “Modern Computer Network Technologies” (MoNeTeC), Moscow, 2020. P. 1–4; doi: 10.1109/MoNeTeC49726.2020.9258311.
2. Baginyan A. et al. // 2020 Intern. Sci. and Techn. Conf. “Modern Computer Network Technologies” (MoNeTeC), Moscow, 2020. P. 1–5; doi: 10.1109/MoNeTeC49726.2020.9258004.
3. Belyakov D. et al. // CEUR Workshop Proc. 2020. V. 2772. P. 1–12.
4. Кашунин И.А. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2020. Т. 17, № 3(228). С. 345–352.
5. Belov S.D. et al. // CEUR Workshop Proc. 2020. V. 2772. P. 52–57.
6. Ososkov G. et al. // Comp. Res. Modeling. 2020. V. 12, No. 6. P. 1361–1381.
7. Baznat M. et al. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2020. V. 17, No. 3. P. 303–324.
8. Elvira V. et al. // J. Instrum. 2020. V. 15. P. 02025.
9. Волохова А.В., Земляная Е.В., Качалов В.В., Рихвицкий В.С. // Компьютерные исслед. и моделирование. 2020. Т. 12, № 5. С. 1081–1095.
10. Zemlyanaya E.V. et al. // J. Phys.: Conf. Seri. 2020. V. 1555. P. 012017.
11. Hristov I. et al. // Discrete and Continuous Models and Appl. Comp. Science. 2020 (submitted); <https://arxiv.org/abs/2010.14993>.
12. Alvarez-Castillo D., Ayriyan A., Barnafoldi G.G., Grigorian H., Posfay P. // Eur. Phys. J. Special Topics. 2020. V. 229. P. 3615–3628; <https://doi.org/10.1140/epjst/e2020-000106-4>.
13. Ayryan E.A. et al. // Lecture Notes Comp. Science. 2020. V. 12291. P. 77–90.
14. Wen P.W. et al. // Phys. Rev. C. 2020. V. 101, No. 1. P. 014618(1)–014618(10).
15. Пузынин И.В. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исслед. 2020. № 12. С. 78–82.
16. Kakenov M., Kukulkin V.I., Pomerantsev V.N., Bayakhmetov O. // Eur. Phys. J. A. 2020. V. 56. P. 266.
17. Chuluunbaatar O. et al. // Chem. Phys. Lett. 2020. V. 746. P. 137304.
18. Amirkhanov I.V., Sarker N.R., Sarkhadov I. // Discrete and Continuous Models and Appl. Comp. Science. 2020. V. 28, No. 4. P. 398–405.
19. Yukalov V.I., Yukalova E.P. // Phys. Rev. Res. 2020. V. 2. P. 028002-3.
20. Yanovich V.A. // Programming Comp. Software. 2020. V. 46, No. 2. P. 162–166.
21. Palii Yu. // J. Math. Sci. 2020. V. 251, No. 3. P. 405–418.
22. Tarasov O.V. // Phys. Part. Nucl. Lett. 2020. V. 17. P. 109–115.
23. Deveikis A., Gusev A.A. et al. // Lecture Notes Comp. Science. 2020. V. 12291. P. 206–227.
24. Lyakhov D.A., Gerdt V.P., Michels D. // J. Symbol Comp. 2020. V. 98. P. 3–22.
25. Корняк В.В. // Программирование. 2021. Т. 47, № 2. С. 124–132.
26. Abgaryan V., Khvedelidze A., Rogojin I. // Lecture Notes Comp. Science. 2021. V. 12563. P. 244.
27. Abgaryan V., Khvedelidze A., Torosyan A. // J. Math. Sci. 2020. V. 251, No. 3. P. 301.
28. Sharma K.K., Gerdt V.P. // Intern. J. Theor. Phys. 2020. V. 59. P. 403–414.
29. Gerdt V.P., Kotkova E.A. // Commun. Comp. Information Science. 2021. V. 1337. P. 129–143.
30. Uzhinskiy A. et al. <http://arxiv.org/abs/2012.07403>. 2020.
31. CEUR Workshop Proc. 2020. V. 2743.
32. Filozova I. et al. // CEUR Workshop Proc. 2020. V. 2790. P. 142–155.
33. Kircher M. et al. // Nature Phys. 2020. V. 16. P. 756–760.
34. Blaschke D., Friesen A. et al. // Eur. Phys. J. Special Topics. 2020. V. 229. P. 3517–3536.
35. Башашин М.В., Земляная Е.В., Стрельцова О.И. Основы технологии OpenMP на кластере HybriLIT: Учеб. пособие. Дубна, 2020.
36. Кореньков В.В. и др. // Системный анализ в науке и образовании. Сетевое науч. изд. 2020. № 3. С. 1–7.