

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Основные направления деятельности Лаборатории информационных технологий нацелены на обеспечение современными телекоммуникационными, сетевыми, информационно-вычислительными средствами, а также новыми математическими и вычислительными методами экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ.

В 2008 г. в лаборатории продолжены исследования и работы по двум темам первого приоритета: «Информационное, компьютерное и сетевое обеспечение деятельности ОИЯИ» и «Математическая поддержка теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ» по направлению «Сети, компьютеринг, вычислительная физика». Лаборатория укомплектована высококвалифицированным научно-техническим персоналом, включая 25 докторов и 63 кандидата наук. Сотрудники лаборатории участвовали в исследованиях по 20 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ и международного сотрудничества ОИЯИ.

ЛИТ получила грант ВМВФ на проведение работ по теме «Развитие грид-инфраструктуры и программных средств для проведения совместных исследований с участием ОИЯИ и немецких научно-исследовательских центров». В рамках соглашения о сотрудничестве между ОИЯИ и ЦЕРН проводились работы по нескольким направлениям: NICE — распределенный компьютеринг на базе ПК, разработка приложений LabVIEW, участие ОИЯИ в проекте LCG. Проект «Развитие грид-сегмента для экспери-

ментов на ЛНС» был поддержан в рамках соглашения о сотрудничестве между ОИЯИ и ЮАР в 2006–2008 гг.

Проводились работы в рамках совместных проектов: NATO EAP.NIG 982956 «DREAMS-ASIA» (Развитие технологии gRid EnAbling в Medicine&Science для Средней Азии), CERN-INTAS, «Всемирный вычислительный грид для ЛНС» (WLCG) и «Развертывание гридов для e-науки» (EGEE). Семь грантов были поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований. Выполнялись работы по двум контрактам с Российским федеральным агентством по науке и инновациям (ФАНИ).

Продолжены работы по проекту СКИФ-ГРИД в рамках совместных проектов национальной академии наук Белоруссии и ФАНИ Российской Федерации «Разработка и использование программно-аппаратных средств грид-технологий и перспективных высокопроизводительных (суперкомпьютерных) вычислительных систем семейства СКИФ в 2007–2010 гг.»

В сотрудничестве с научно-исследовательским институтом ядерной физики МГУ, Курчатовским институтом и Петербургским институтом ядерной физики ЛИТ участвует в реализации проекта «ГридННС» по созданию национальной нанотехнологической сети, который реализуется в рамках федеральной целевой программы развития инфраструктуры наноиндустрии в Российской Федерации в 2008–2010 гг.

СЕТЕВАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ

В 2008 г. были продолжены работы, направленные на обеспечение надежного функционирования и развития сетевой информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ. Ключевыми составляющими этой инфраструктуры являются телекоммуника-

ционные каналы связи ОИЯИ, локальная сеть, центральный информационно-вычислительный комплекс (ЦИВК) ОИЯИ и базовое программное обеспечение, ответственное за объединение информационно-вычислительных ресурсов Инсти-

туда в единую информационно-вычислительную среду, доступную для всех пользователей, в том числе с использованием грид-технологий.

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ. В 2008 г. подписан договор между ОИЯИ и Федеральным государственным предприятием «Космическая связь» (ГПКС) об аренде волоконно-оптического кабеля для организации каналов связи между Москвой и Дубной. Проект реализуется совместно ОИЯИ, ГПКС, РосНИИРОС, Центром взаимодействия компьютерных сетей «МСК-IX», компаниями NORTEL и JET Infosystems. В рамках этого проекта с использованием современных технологий DWDM и 10Gb Ethernet строится высокоскоростной канал связи Дубна–Москва. В первом квартале 2009 г. планируется увеличение пропускной способности канала Дубна–Москва до 20 Гбит/с. Используемые технологии позволяют построить на этой базе до 72 каналов по 10 Гбит/с каждый.

Российская национальная научная сеть формируется как интегрированная информационная среда. Ее связующей основой является сеть RBNNet. Важную роль в развитии национальной научной инфраструктуры играют сети RUNNet, RASNet и RUHER, а также ведомственные и региональные сети. Начался процесс перевода магистральных каналов этих

сетей на технологию DWDM, что позволит существенно увеличить пропускную способность каналов (от 10 Гбит/с до сотен Гбит/с) и перейти на новый уровень сервиса.

Развитие международного сегмента каналов связи для науки и образования России с Европой осуществляется в рамках проекта GEANT. Это должно позволить увеличить пропускную способность каналов до 10 Гбит/с в 2009 г. с последующим ростом в 2010–2016 гг. В странах-участницах ОИЯИ строятся региональные и национальные исследовательские и образовательные сети, многие из которых связаны с европейской сетью GEANT. В результате будет реализовано объединение грид-инфраструктур ОИЯИ и стран-участниц через высокоскоростную европейскую сеть GEANT. Такой подход является общепринятым в Европе при объединении региональных сетей для науки и образования.

В 2008 г. к системе статистического контроля внешнего трафика добавлен модуль, позволяющий разделять трафик по категориям: трафик с научными сетями, трафик с дубненскими сетями, трафик мультимедийных трансляций и т. д.

На рис. 1 приведено распределение входящего трафика по подразделениям ОИЯИ. Трафик серверов и ЦИВК включает общий грид-трафик ОИЯИ.

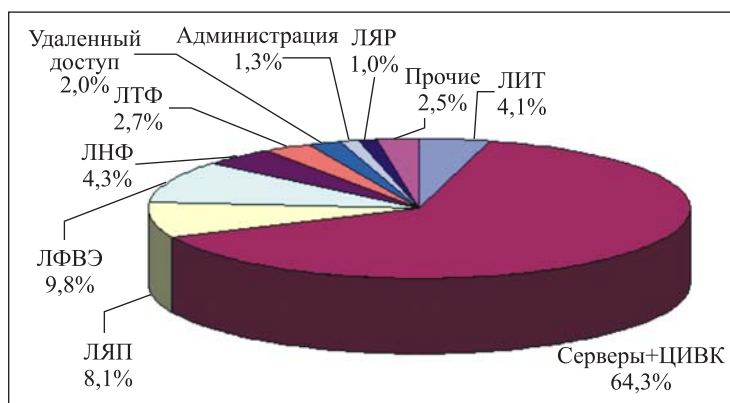


Рис. 1. Распределение входящего трафика по подразделениям ОИЯИ

Локальная сеть ОИЯИ. Обеспечение бесперебойной работы локальной вычислительной сети (ЛВС) ОИЯИ является основной задачей сетевой службы ЛИТ. В настоящее время ЛВС включает в себя 6370 компьютеров и узлов (5880 — в 2007 г.). В 2008 г. в ЛВС было зарегистрировано 3562 пользователя, более 1500 пользователей сервиса mail.jinr.ru и 1300 пользователей удаленного доступа. Свыше 120 сетевых узлов находятся в круглосуточном мониторинге (шлюзы, серверы, опорные коммутаторы и т. п.). Осуществляется поддержка 15 серверов и обслуживается свыше 40 пользовательских запросов за смену. Внедрение новых систем защиты от спама позволило фиксировать порядка миллиона спам-сообщений в сутки для центральных почтовых

серверов. В 2008 г. регистрационный механизм доступа к внешним библиотекам интегрирован в реестр пользователей ОИЯИ — базу IPDB. Всего на октябрь 2008 г. зарегистрировано более 800 пользователей внешних электронных библиотек; в среднем в месяц регистрируется по 20 новых пользователей.

Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ. В течение последних двух лет вычислительная мощность ЦИВК ОИЯИ выросла за счет приобретения мультипроцессорных модулей от ведущих поставщиков вычислительной техники. В 2007 г. были приобретены три модуля (два от компании «Т-платформы» и один от фирмы Hewlett Packard), каждый из них состоит из 40 двухъядерных процессоров 2,66 ГГц Intel Xeon 5150. В течение

2008 г. дополнительно было приобретено четыре blade-сервера от компании «Supermicro»: три состоят из 20 четырехъядерных процессоров, 2,66 ГГц Intel Xeon E5430 каждый, а четвертый содержит 20 четырехъядерных процессоров 3,0 ГГц Intel Xeon X5450. Передача данных организована на технологии Гигабит Ethernet (GbE), каждый blade-сервер связан с главным коммутатором опорной сети через GbE-магистраль с четырьмя портами, таким образом, суммарная скорость подключения промежуточных blade-серверов увеличена до 4 Гбит/с. Четвертый blade-сервер может работать и как выделенный параллельный модуль на шине InfiniBand.

Таким образом, в 2008 г. кластер ЦИВК ОИЯИ представлял собой гетерогенную 560-ядерную структуру. Оценка производительности с использованием High Performance LINPACK тестов суммарно составляет 2,982 TFlops, в то время как сумма его трех однородных частей насчитывает 3,3374 TFlops [1].

По состоянию на лето 2008 г. производительность ЦИВК выражалась 1400 kSI2K (SI2K — это условные единицы, которые обычно используются для оценки вычислительной мощности в соответствии со специальным тестом Spec Integer 2000, и 2,5 kSI2K приблизительно соответствует вычи-

слительной мощности одного ядра процессора Intel Xeon 2,8 ГГц). Объем дисковой памяти составил 100 Тбайт (82 Тбайт — для пользовательских каталогов, программного обеспечения и хранения больших объемов данных). В конце 2008 г. по контракту ФАНИ «Разработка вычислительной системы для развития грид-комплекса RuTier2/RDIG для выполнения российскими институтами распределенного анализа данных для экспериментов LHC как сегмента глобальной грид-системы WLCG/EGEE» было куплено новое оборудование. После ввода в строй этого оборудования производительность ЦИВК составит 2000 kSI2K, а объем системы массовой памяти — 400 Тбайт. На рис.2 представлена схема новой структуры ЦИВК.

Ресурсы ЦИВК активно используются экспериментами E391a, KLOD, COMPASS, CDF, D0, DIRAC, CM, ALICE, ATLAS, H1, OPERA, HERMES, CBM, PANDA и др. для моделирования физических процессов и анализа экспериментальных данных. Все ресурсы ЦИВК для вычислений и хранения данных могут использоваться как локально, так и глобально (для распределенного компьютеринга в рамках грид-инфраструктуры WLCG/EGEE и в рамках

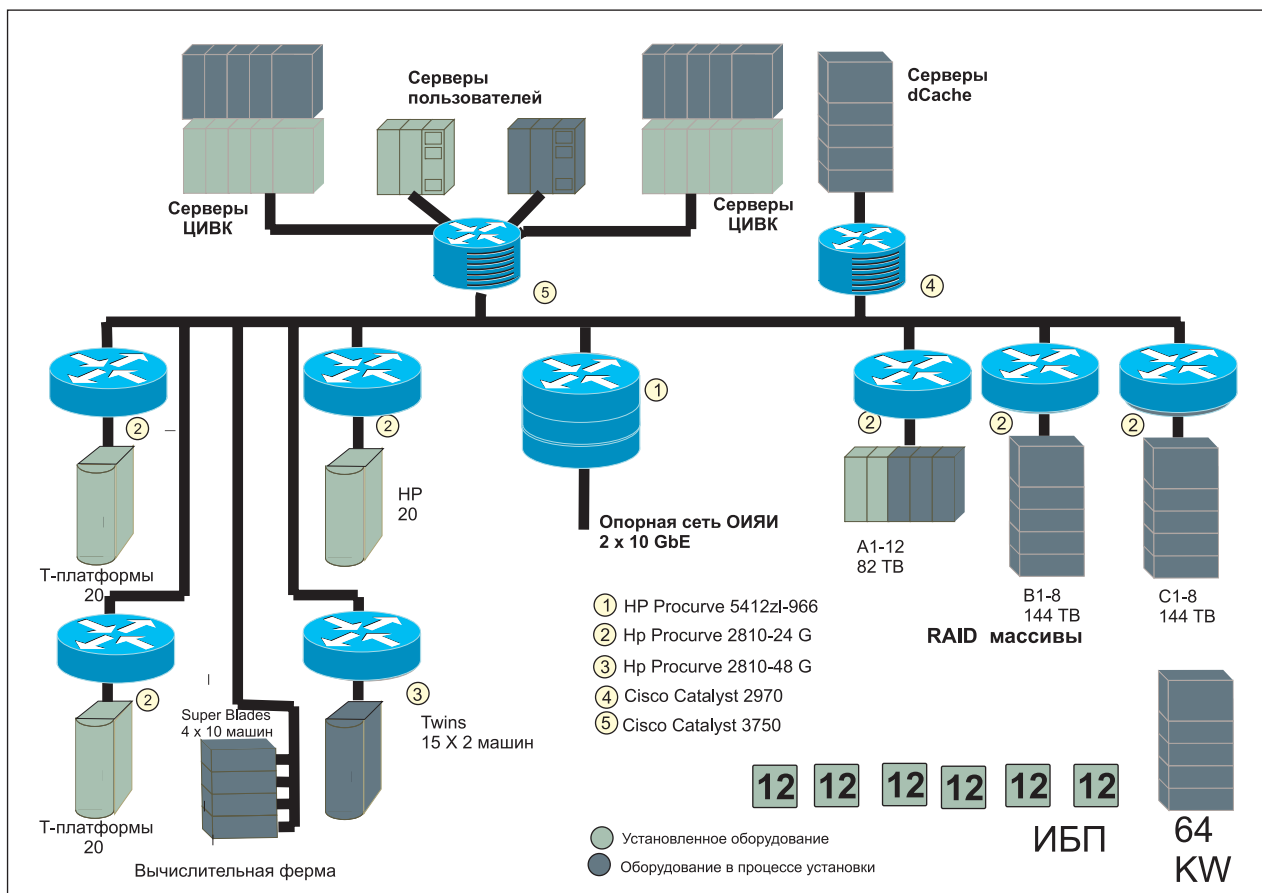


Рис. 2. Схема новой структуры ЦИВК ОИЯИ

Таблица 1

Лаборатории/группы	ЛЯП	ЛФВЭ	PANDA	ЛИТ	ЛЯР	ЛТФ	ЛНФ	foton2	na48	Всего
Число заданий	32435	13925	12913	3554	1865	1275	774	161	55	66957
Процессорное время (kSI2K·ч)	476237	35092	6112	66598797	13815	2867176	1064907	9755	20	71071911
Астрономическое время (kSI2K·ч)	485187	54066	84740	202087	3723	236726	136368	9997	22	1212916

Таблица 2

Грид ВО	atlas	cms	alice	biomed	lhcb	ops	hone	fusion	dteam	lrgst	Всего
Число заданий	342159	327330	161437	48372	36433	28952	23747	10525	7893	200	987 048 (в 2007 — 220 793)
Процессорное время (kSI2K·ч)	1151012	1246384	1400131	799909	547456	1464	447568	376339	23	1	5 970 287 (в 2007 — 1 834 466)

консорциума «Российский грид для интенсивных операций с данными» (RDIG)) для всех проектов, в которых принимают участие физики ОИЯИ. Программное обеспечение ЦИВК оптимизировано с целью наиболее эффективного использования вычислительных ресурсов вместе с максимально защищенным и наиболее универсальным доступом к данным. Для распределения и учета ресурсов используются система пакетной обработки заданий Torque и планировщик Maui.

Доступ к данным в основном обеспечивается системой dCache и частично с помощью NFS. Для домашних каталогов пользователей и программ общего назначения используется Andrew File System (AFS), а для защиты программ, данных и авторизации пользователей ЦИВК — система Kerberos5.

В табл. 1 приведено распределение пакетных заданий по подразделениям Института и группам пользователей, за исключением участников грид-проектов в 2008 г.

В табл. 2 приведены данные по использованию грид-инфраструктуры ЦИВК ОИЯИ виртуальными организациями (ВО), входящими в WLCG/EGEE.

Грид-среда ОИЯИ. В последние годы ОИЯИ принимает активное участие в двух крупномасштабных грид-проектах мирового уровня: «Всемирный вычислительный грид для ЛHC» (Worldwide LHC Computing Grid (WLCG), <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>) и «Развертывание гридов для е-науки» (Enabling Grids for E-science (EGEE), <http://www.eu-egee.org/>).

Участие в проекте WLCG/EGEE включает в себя поддержку и развитие WLCG-инфраструктуры в ОИЯИ в соответствии с требованиями экспериментов на ЛHC на стадии их проведения; участие в тестировании/оценке промежуточного программного обеспечения (ППО) WLCG; разработку инструментария для мониторинга грид-среды; поддержку и развитие портала WLCG в ОИЯИ; развитие базы дан-

ных моделированных физических событий (MCDB); обучение пользователей грид-инфраструктуры; поддержка стран-участниц ОИЯИ в их деятельности по проекту WLCG.

В 2008 г. ЦИВК был переведен на ППО нового поколения gLite (текущая версия — gLite-3.1.0), а операционная система Scientific Linux 3 была заменена на Scientific Linux 4. Пользователи могут получать доступ к ресурсам LCG/EGEE через службу пользовательского интерфейса (UI), установленную на интерактивных компьютерах ЦИВК ОИЯИ. В настоящее время в ОИЯИ предоставляются все основные и специальные грид-сервисы и специализированные службы VOboxes для экспериментов ALICE, CMS и PANDA. Программное обеспечение, необходимое для ВО, в настоящее время установлено на сайте ОИЯИ LCG/EGEE, включая пакеты dCache xrootd door, AliROOT, ROOT, GEANT для ALICE; пакеты ATLAS; пакеты CMSSW для CMS; пакеты DaVinci и Gauss для LHCb.

В 2008 г. для поддержки пользователей и стимулирования активного использования WLCG-ресурсов были организованы специализированные образовательные курсы и лекции (<http://www.egее-rdig.ru/rdig/user.php>).

В 2008 г. ЛИТ в сотрудничестве с центрами уровня Tier1 в Карлсруэ (FZK), ЦЕРН (CERNPROD) и Амстердаме (SARA) участвовала в крупномасштабных сеансах массового моделирования, обработки и анализа физических событий в распределенной среде с использованием грид-технологий (Service, Data, Software and Analysis Challenges, MC Production) для экспериментов ALICE, CMS и ATLAS; в пробных сеансах передачи данных CMS PhEDEx (сервис PhEDEx для ОИЯИ и российских институтов поддерживается на CMS VObox в ОИЯИ). Осуществлялась поддержка ПО для ALICE в ОИЯИ и в центрах ресурсного обеспечения ALICE в Рос-

сии. Продолжены работы по тестированию и оценке ППО WLCG, поддержке и развитию системы мониторинга (<http://rocmon.jinr.ru:8080>) российской грид-инфраструктуры RuTier2/RDIG. Разработана система мониторинга и тестирования сервиса передачи данных (FTS) (<https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/LCG/TransferOperations>) [2]. В рамках совместных с ЦЕРН работ по созданию систем мониторингования экспериментов LHC в грид-среде (LHC Dashboard) разработан и реализован новый веб-интерфейс для системы CMS Dashboard, включая мониторинг системы монте-карловских расчетов CMS, мониторинга задач Condor-G и т. д.

В 2008 г. произведена реконструкция лаборатории GridLab в ЛИТ, созданной в рамках проекта «ДубнаГрид», и развернута полнофункциональная образовательная аудитория по грид-технологиям.

Проведен анализ и выбор вариантов ППО как основы внутренней информационной шины системы удаленного доступа реального времени (СУДРВ). Построен работающий прототип СУДРВ для эксперимента ATLAS, использующий зеркало публикуемых online-данных с Point 1 на Ixplus (ЦЕРН). Реализован удаленный мониторинг этих данных. Продолжены работы по развитию и поддержке компонентов ATLAS TDAQ: Event Dump, Resource Manager, WMI.

Результаты работы по компьютерингу WLCG/EGEE представлены в табл. 3, где приведены данные по первым, наиболее производительным вычислительным центрам инфраструктуры EGEE/WLCG для виртуальных организаций LHC (ALICE, ATLAS, CMS и LHCb) по нормированному процессорному времени, опубликованные на портале оперативного учета проекта EGEE ([http://www3.egee.cesga.es/gridsite/ac-](http://www3.egee.cesga.es/gridsite/ac-counting/CESGA/ egee_view.html)

counting/ CESGA/ egee_view.html) за период с июня по декабрь 2008 г. (после модернизации ЦИВК ОИЯИ в июне 2008 г.).

Таблица 3

FZK-LCG2	7356145
GRIF	5866168
N2P3-CC-T2	5410861
IN2P3-CC	5033304
NIKHEF-ELPROD	4985490
TRIUMF-LCG2	4491970
NDGF-T1	3763150
RWTH-Aachen	3634905
RAL-LCG2	3436688
JINR-LCG2	3340491

Работы по поддержке компьютеринга WLCG особенно важны в преддверии запуска LHC, который ожидается в 2009 г. Российская грид-инфраструктура для распределенных вычислений, адаптированная к экспериментам на LHC, была успешно построена как распределенный RuTier2 (Российский Tier2) кластер. В соответствии с вычислительной моделью RDIG для LHC распределенный кластер RuTier2 работает с ресурсами, расположенными в различных институтах и распределяет их между всеми LHC-экспериментами. ЦИВК ОИЯИ, как сегмент RDIG-инфраструктуры, используется ВО LHC и другими ВО, зарегистрированными в RDIG, для моделирования и анализа экспериментальных данных. Эти ресурсы надежно и успешно использовались в течение 2007–2008 гг.; вклад ЦИВК в RDIG составил приблизительно 44 % (см. рис. 3 и 4).

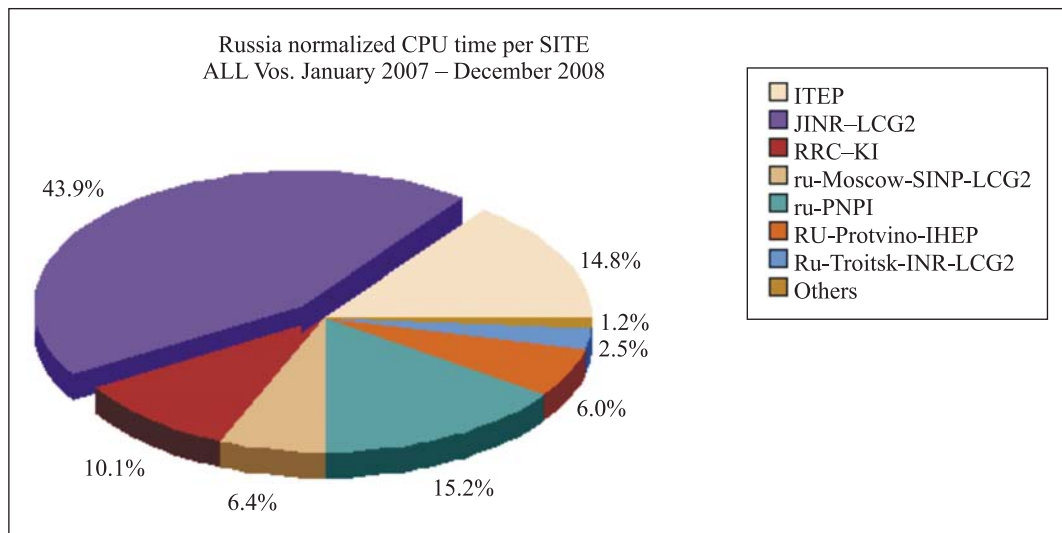


Рис. 3. Распределение нормированного процессорного времени по грид-центрам RDIG (данные получены с портала http://www3.egee.cesga.es/gridsite/accounting/CESGA/tier2_view.html)

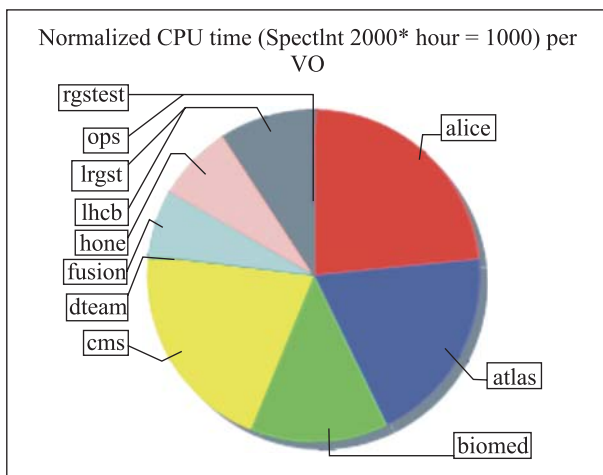


Рис. 4. Распределение нормированного процессорного времени по виртуальным организациям в грид-среде ЦИВК ОИЯИ за 2008 г.

Информационная и программная поддержка. Продолжалось последовательное развитие библиотеки программ JINRLIB для решения широкого диапазона физических и математических задач, возникающих в процессе научно-исследовательской деятельности ОИЯИ. Программные пакеты JINRLIB, создаваемые специалистами ОИЯИ, отражающие широкий спектр научных задач Института, регулярно обновляются и библиотека пополняется новыми программами. Библиотеки объектных модулей математических программ общего назначения подготовлены для ОС Scientific Linux 4 с архитектурой CPU x86_64 для трансляторов GNU Fortran 77, GNU Fortran 95 и Intel Fortran Compiler. Поддерживаются

и пополняются прежние библиотеки объектных модулей для ОС Scientific Linux 3 и Windows 9X/NT/2000XP.

Обеспечивается сопровождение библиотек программ, разрабатываемых другими научно-исследовательскими центрами и организациями (CPCLIB, CERNLIB), а также информационно-техническая поддержка пользователей. Полная информация по библиотекам программ ОИЯИ доступна на специализированном WWW-сайте <http://www.jinr.ru/programs/>, а также в бюллетене новостей ЛИТ (http://lit.jinr.ru/Inf_Bul_4/bullet.pdf).

Традиционное обеспечение информационной, алгоритмической и программной поддержки научно-производственной деятельности ОИЯИ включает большой спектр работ как на уровне ЛИТ, так и на уровне ОИЯИ. В 2008 г. проводилась регулярная актуализация программной среды и контента центральных информационных сайтов ЛИТ и ОИЯИ (<http://www.wininfo.jinr.ru>, <http://lit.jinr.ru> и др.), поддержка баз данных, необходимых для функционирования этих сайтов. Сотрудники лаборатории совместно с НТО АСУ ОИЯИ осуществляли сопровождение и модернизацию программного обеспечения и баз данных административно-хозяйственного профиля для бухгалтерии ОИЯИ, перевод программ в версию 8.0 1С.

В 2008 г. продолжено участие в режиме хостинга в разработке, создании и поддержке информационных веб-сайтов различных конференций, совещаний, симпозиумов, организатором которых является ЛИТ и лаборатории ОИЯИ. Продолжалась работа над информационной системой, разработанной в ЛИТ ОИЯИ для внутреннего безбумажного документооборота (<http://lit.jinr.ru/DoctorDoc>).

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Основной задачей данного направления исследований в ЛИТ является обеспечение математической, алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. В 2008 г. по результатам исследований опубликовано более 150 научных работ в ведущих научных журналах и материалах конференций. Более 90 докладов представлено на международных конференциях.

Существенные усовершенствования были сделаны в модели Fritiof (FTF). В настоящее время они учтены в последней версии 9.2 пакета Geant4. Два новых набора (Physics lists), FTFP и FTF_BIC, использующих модель Fritiof, были предложены в пакете Geant4. Модель UrQMD версии 1.3 была протестирована на пион-ядерных взаимодействиях.

Ошибки в версиях модели 1.3 и 2.3 были найдены и исправлены. Усовершенствованная версия 1.3 используется в проекте NICA. Хорошо известная модель AMPT, установленная на специализированном сервере HEPWEB (<http://hepweb.jinr.ru>), протестирована для энергий RHIC.

Установлены новые версии программы Fitter на языке C++, предназначенной для фитирования экспериментальных данных, заданных многопараметрической функцией. Для более широкой применимости в программу добавлены некоторые стандартные математические модели и модуль минимизации. Важной особенностью Fitter является возможность ее расширения: новые модели и новые алгоритмы минимизации могут легко добавляться к уже существующим. Издано подробное описание новой версии Fit-

ter [3]. Обновленный программный пакет Gluplot для визуализации данных внесен в библиотеку программ ОИЯИ. Gluplot позволяет работать как с кривыми (2D), так и с поверхностями (3D) [4].

Разработаны алгоритмы реконструкции траекторий заряженных частиц и их идентификации с помощью детектора переходного излучения TRD (Transition Radiation Detector) для эксперимента CBM (GSI). Алгоритм распознавания траекторий частиц основан на методе слежения по треку с применением фильтра Калмана. Идентификация электронов/пионов проводилась с помощью прямооточной нейронной сети, использующей в качестве входной информации потери энергии в детектирующих слоях TRD. Представлены первые результаты по оптимизации геометрии TRD с учетом эффективностей реконструкции траекторий, идентификации электронов и подавления пионов [5].

Совместно с GSI, Дармштадт, Германия, разработан базирующийся на подходе MAPPING автоматический генератор пространственных сеток, удовлетворяющих требованиям метода конечных элементов. Создан удобный пользовательский интерфейс для задания входной геометрии. Разработан инструментарий для описания стандартных и нестандартных токовых обмоток с различным поперечным сечением. Предложенный генератор может быть использован как препроцессор для решения широкого класса задач, базирующихся на методе конечных элементов [6].

Продолжаются работы в рамках исследований сечений ϕ -мезонов и дифракционной структурной функции протона F_2^D на экспериментальных данных

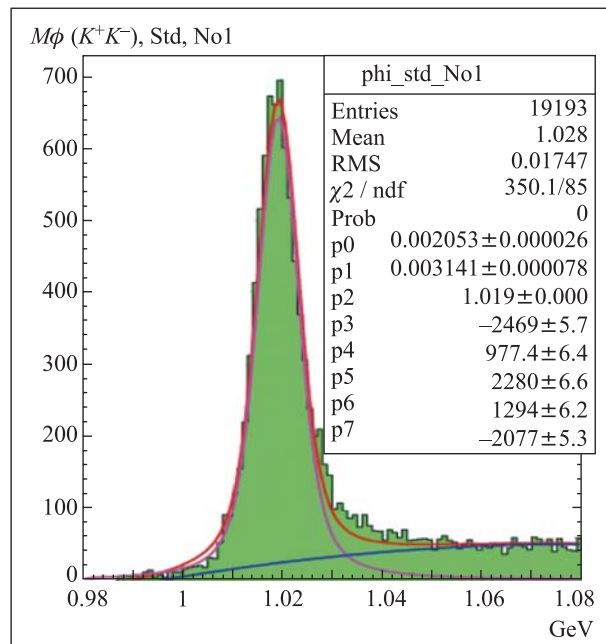


Рис. 5. Фоторождение упругих ϕ -мезонов, полученное на экспериментальных данных 2005–2007 гг. в эксперименте H1 (DESY)

эксперимента H1 со спектрометром FPS (Forward Proton Spectrometer). Фоторождение упругих ϕ -мезонов, полученное на экспериментальных данных 2005–2007 гг., представлено на рис. 5 [7].

В актуальной версии CMSSW на данных эксперимента CMS с космическими мюонами с магнитным полем 3,8 Тл получена оценка пространственного разрешения дубненской катодно-стриповой камеры — 46 мкм, что хорошо согласуется с техническими требованиями эксперимента. При этом были выполнены дополнительные коррекции наведенных помех (кросс-токов) от соседних каналов [8].

Для процессов рассеяния пионов и ρ -мезонов на J/ψ предложена новая схема введения формфакторов в SU(4) кирально-инвариантные лагранжианы. Проведенные вычисления с мезонными формфакторами гауссовой формы сравниваются с обычной моделью, использующей один общий для всех вершин формфактор. Модель с новыми формфакторами откалибрована по результатам расчетов рассеяния пионов, проведенных в рамках релятивистской кварковой модели, и сделаны предсказания для процессов с участием ρ -мезона. Фитирование полученных сечений предполагается использовать для разработки дальнейших модельных вычислений [9].

Создан комплекс программ KANTBP 2.0 для вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектра многомерных квантовых систем методом Канторовича (МК). Метод Канторовича применен для вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектра атома водорода в магнитном поле и вычисления сечений фотоионизации линейно-поляризованным светом вдоль оси z из начального состояния дискретного спектра в конечное состояние непрерывного спектра. Разработан и программно реализован на языке FORTRAN 77 метод эффективного вычисления потенциальных кривых и матричных элементов для связанных радиальных уравнений, описывающих поведение водородоподобного атома в однородном магнитном поле. Эффективность метода существенно опирается на разработанные и программно-реализованные в системе компьютерной алгебры MAPLE алгоритмы вычисления в аналитическом виде асимптотик базисных функций, матричных элементов и радиальных решений. Проведено численное исследование модели фотоионизации и скоростей лазерно-индуцированной рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле подходящей магнитно-оптической ловушки, впервые предсказаны эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле [10].

Рассмотрена анизотропная космологическая модель типа Бианки-I в присутствии магнитного поля. Получены точные решения на основе общепринятых предположений, часто используемых в литературе.

Аналитические решения дополнены численным и качественным анализом. В рамках представленной модели обсуждаются как вопросы эволюции Вселенной, так и другие физические аспекты [11].

Исследована самосогласованная система взаимодействующих спинорного и скалярного полей в рамках гравитационного поля типа Бианки-I в присутствии вязкой жидкости и лямбда-члена. Получена и качественно изучена соответствующая система уравнений. Эта система была рассмотрена в режиме с обострением. Показано, что при отсутствии вязкости обострения не происходит. Необходимо подчеркнуть, что явления, подобные рассматриваемому, могут наблюдаться в других областях физики и представляют определенный интерес с точки зрения теории катастроф, демографии и т. п. [12].

На основе микроскопических расчетов вещественной и мнимой частей оптического потенциала (ОП) проведен анализ данных по сечениям упругого рассеяния ${}^6\text{He} + p$ при энергиях в десятки МэВ/нуклон. Изучено влияние зависимости нуклон-нуклонного потенциала от плотности ядерного вещества на рассчитанные сечения, роль спин-орбитального взаимодействия и нелинейности микроскопического ОП, а также роль его перенормировки. Путем сравнения с экспериментальными данными исследована чувствительность сечений к этим эффектам [13].

Взаимодействия релятивистских тяжелых ионов с полной энергией, превышающей 30 ГэВ, в протяженных медных и свинцовых мишенях (> 2 см) исследовались с применением различных методик. Для математического моделирования этих процессов использовались каскадная модель (DCM) и программа MCNPX. Проведено сравнение расчетных данных с результатами экспериментов на ускорителях в ОИЯИ (Дубна), LBL (Беркли), Сакле (Франция) и т. д. Показано, что генерация нейтронов ионами ${}^{12}\text{C}$ с энергией 44 ГэВ превышает ожидаемые значения, полученные экстраполяцией данных в экспериментах с ионами ${}^{12}\text{C}$ при энергии 12 ГэВ [14].

На основе решения нелинейного уравнения диффузии с начальными и граничными условиями найден коэффициент переноса влаги в образце пористого материала путем минимизации по методу Ньютона функционала погрешности, выражающего отклонение вычисленных профилей концентрации влаги в определенные моменты времени от их экспериментальных значений. Коэффициент переноса, в отличие от предыдущих работ, находится как сумма степенной и экспоненциальной функций концентрации влаги. Экспоненциальный член позволяет получить хорошее согласие указанных профилей для больших времен вблизи границы образца, где происходит испарение влаги в атмосферу [15].

Совместно с ЛЯР проведены исследования, связанные с получением наноструктур в материалах при облучении их тяжелыми ионами высоких энергий.

Представлены результаты численных расчетов, полученные в рамках модели термического пика для анизотропного материала на примере высокоориентированного пиролитического графита. Проведено сопоставление расчетных эффектов с экспериментальными данными, предложены новые эксперименты и теоретические подходы [16].

Предложен метод запутывания мод, основанный на генерации топологических мод в системах с бозе-эйнштейновским конденсатом в оптических или магнитных ловушках и решетках. Метод позволяет регулировать степень запутывания, а также управлять ее эволюцией во времени. Этот метод может использоваться для обработки квантовой информации и квантовых вычислений [17].

Предложен новый метод численного решения краевых задач для систем нелинейных дифференциальных уравнений, заданных на разных вложенных интервалах изменения независимой переменной. Алгоритм основывается на непрерывном аналоге метода Ньютона. Численное решение соответствующих линейных краевых задач на каждой итерации проводится методом сплайн-коллокации. В качестве конкретного примера рассматривается задача о возможных распределениях магнитного потока в двухслойном джозефсоновском контакте, отдельные субконтакты которого имеют разные длины. Рассмотрено влияние отношения длин субконтактов на физические характеристики некоторых основных пар распределений в системе. Для некоторого класса распределений демонстрируется наличие точки бифуркации при варьировании длины короткого субконтакта [18].

Исследованы некоторые задачи конструирования оптимальных биосенсоров. Рассчитаны электростатические свойства целого ряда ферментов и нуклеиновых кислот. Полученные результаты раскрывают ряд закономерностей взаимодействия ферментов с заряженными наноструктурами и могут быть непосредственно использованы в процессе проектирования биосенсоров при условии разработки программных средств систематизации и обобщения данных по иммобилизованным белкам в виде соответствующей базы данных и экспертной системы. Разработанные программные средства могут стать первым шагом на пути реализации вычислительной нанотехнологии для разработки биосенсоров с заданными свойствами [19].

Одной из важных задач квантовой инженерии является конструирование разнообразных квантовых структур, обладающих желаемыми спектральными свойствами. Эта проблема возникает при создании различных гетероструктур, решеток, квантовых компьютеров и т. д. Базисными элементами современной микро- и наноэлектроники являются структуры низкой размерности, которые образованы из квантовых ям, точек, проволок. С теоретической точки зрения, возникает проблема определения потенциалов

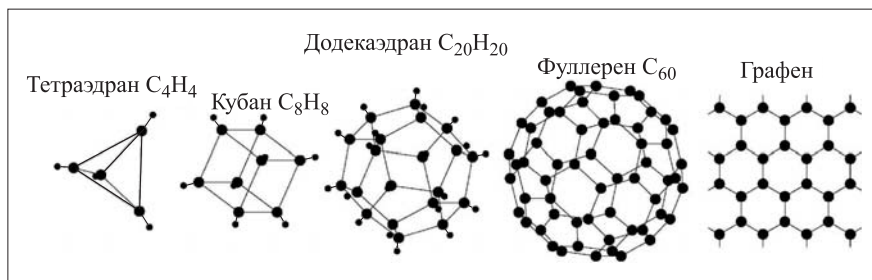


Рис. 6. Угле(водо)родные наноструктуры— типичные примеры дискретных систем с высокой симметрией

квантовых ям, которые поддерживали бы желаемый спектр. Положительное решение этой проблемы позволило бы сделать квантовую инженерию более эффективной и гибкой, что обеспечило бы условия для развития новых квантовых объектов. В последнее время обобщенное уравнение Шредингера с эффективной массой, зависящей от пространственной переменной, широко используется для моделирования электронных свойств нанобъектов [20].

Точное решение аппроксимации среднего поля функции Грина эффективной двумерной двухзонной модели Хаббарда для описания высокотемпературного фазового перехода в купратах выявило три важные особенности модели. Во-первых, в то время как гипотеза разделения спина-заряда в купратах, что неоднократно подчеркивал П. Андерсон, расходится с существованием ферми-поверхности в этих структурах, основные результаты данного исследования свидетельствуют о фактическом существовании разделения спина-заряда и его альтернативном объяснении. Во-вторых, двухзонная модель Хаббарда предсказывает соблюдение сверхпроводящего состояния при минимизации кинетической энергии системы в соответствии с данными ARPES. В-третьих, заряд-заряд-аномальные спаривания могут быть строго переформулированы в терминах локализованных пар Купера для купратов, как легированных дырками, так и легированных электронами [21].

Компьютерная алгебра. Развита алгоритм декомпозиции систем алгебраических уравнений многих переменных на треугольные подсистемы с непересекающимся пространством решений [22]. Данный алгоритм является составной частью общего алгоритмического метода приведения в инволюцию систем нелинейных уравнений в частных производных.

Подробно исследована [23] $SU(n)$ -механика Янга–Миллса на световом конусе. В рамках форма-

лизма Дирака для вырожденных гамильтоновых систем найден полный набор и дана классификация связей в моделях со структурными группами $SU(2)$ и $SU(3)$. Все расчеты проводились с использованием техники базисов Гребнера теории полиномиальных идеалов.

Дискретные динамические системы и мезоскопические решеточные модели исследованы [24] с точки зрения их групповых симметричных свойств. Изучены особенности поведения динамических систем, связанные со спецификой присущих им симметрий. Для этой цели была написана программа на языке С, которая позволяет, в частности, строить фазовые портреты дискретных динамических систем и находить системы, обладающие специальными свойствами, например, обратимостью их динамики. Типичными примерами дискретных систем с высокой симметрией являются угле(водо)родные наноструктуры (рис. 6).

Обнаружены нетривиальные связи между симметриями и динамикой дискретных систем. В частности показано, что формирование движущихся солитоноподобных структур является типичным для дискретных систем с нетривиальными группами симметрий. Эти структуры представляют собой аналоги «космических кораблей» в клеточных автоматах и «обобщенных когерентных состояний» в квантовой физике.

Предложен метод описания динамики составных систем, взаимодействующих с сильным лазерным полем, основанный на учете релятивистских и квантовых эффектов, обусловленных высокой интенсивностью лазерного излучения [25]. На основе данного метода разработан новый квазиклассический подход к описанию динамики системы частиц в сильном лазерном поле.

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В сотрудничестве с немецкими центрами в 2008 г. проведена тестовая передача файлов между FZK и ОИЯИ для сертифицирования каналов связи между центрами. В октябре 2008 г. канал был успешно

протестирован в рамках системы передачи данных CMS PhEDEx и сертифицирован для эксперимента CMS. Максимальная скорость передачи превышала 37 Мбит/с.

Продолжены совместные работы с DESY (Гамбург) в области разработки базы данных моделированных физических событий эксперимента H1. Сформирована и запущена на грид-сайте ОИЯИ очередь для ВО HONE эксперимента H1, которая активно использовалась для моделирования событий. С декабря 2007 г. по ноябрь 2008 г. выполнено более 23 тысяч заданий ВО HONE (4 % от общего количества заданий ВО HONE за указанный период).

Совместно с ЛНФ, PSI (Швейцария) и Университетом Мартина Лютера (Германия) в ЛИТ проведен численный анализ данных малоуглового рассеяния нейтронов для исследования структуры и свойств четырехкомпонентной мембраны на основе церамиды 6 в однослойных везикулах при двух значениях температуры: 32 и 60 °С. Расчеты в рамках метода разделенных формфакторов показали, что наноструктура бислоя однослойных везикул в избытке воды отличается от наноструктуры частичного гидратированного плоского бислоя. В области малых углов рассеяния наблюдается расхождение расчетной кривой с экспериментальным спектром, которое указывает на

сильное короткодействующее взаимодействие везикул между собой и образование кластерных структур, что подтверждает явление chain-flip-переходов [26].

Сотрудниками ЛИТ, Софийского и Пловдивского университетов Болгарии предложены новые методы математического моделирования джозефсоновских структур. Построен новый эффективный алгоритм для решения нелинейных краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений, моделирующих распределения магнитного потока в многослойных джозефсоновских контактах. Алгоритм основывается на непрерывном аналоге метода Ньютона. Возникающие на каждой итерации линейные краевые задачи решаются численно методом конечных элементов. Глобальная устойчивость распределений исследуется при помощи матричной задачи Штурма–Лиувилля. Для ее решения применяется метод итераций подпространств. В качестве примеров анализируются существование и устойчивость при изменении параметров некоторых основных типов распределений магнитного потока в трехслойном джозефсоновском контакте [27].

СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

С 28 января по 2 февраля 2008 г. состоялась пятнадцатая междисциплинарная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Специфика конференций под этим названием заключается в том, что они носят научно-образовательный, междисциплинарный характер, предоставляют возможность профессионального научного общения на секционных заседаниях и стендовых сессиях и дают возможность научной молодежи общаться с опытными учеными и преподавателями, обсуждать свои результаты.

Традиционное 12-е рабочее совещание по компьютерной алгебре проходило в ЛИТ ОИЯИ с 14 по 16 мая. Основная цель совещаний — обеспечить форум для обсуждения современных методов, алгоритмов и систем компьютерной алгебры как специалистами в области информатики, так и математиками и физиками, применяющими компьютерно-алгебраические методы в своих исследованиях. На совещании был представлен ряд новых результатов по повышению вычислительной эффективности алгоритмов решения систем алгебраических, дифференциальных и разностных уравнений; моделированию квантовых вычислений и исследованию перепутанности многочастичных квантовых систем, важному для задач квантовой информатики; решению краевых задач, возникающих в атомной физике и инженерных науках.

Международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании» проходила с 30 июня по 4 июля 2008 г. Эта кон-

ференция — единственная в России, посвященная вопросам развития и применения грид-технологий и связанным с этим другим аспектам информационных технологий, — была организована ЛИТ уже в третий раз при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. Программа конференции включала не только вопросы, связанные с созданием и эксплуатацией грид-инфраструктуры и грид-приложений, но и теоретические и практические аспекты использования распределенных вычислительных сред, распределенной обработки данных и другие. С деятельностью своих компаний участников конференции познакомили спонсоры конференции — представители компаний «Т-платформы», «SuperMicro», «EtegroTech.», IBM. В этот раз конференция собрала 228 участников из 20 стран, а также ЦЕРН и ОИЯИ. Россия была представлена участниками из 49 университетов и исследовательских центров. На конференции работали секции: «Грид-приложения», «WLCG — Worldwide LHC Computing Grid», «Грид-сервисы и архитектура», «Подготовка кадров по перспективным направлениям ИТ». Силами сотрудников Лаборатории информационных технологий ОИЯИ было организовано специальное лекционное заседание по грид-технологиям для начинающих пользователей. На пленарных заседаниях были представлены статусные доклады представителей институтов — активных разработчиков и пользователей мировой грид-инфраструктуры. Подобная конференция является одним из мощнейших инстру-

ментов консолидации, распространения опыта, привлечения новых участников. Она становится все более полезной и важной для развития грида в России и странах-участницах ОИЯИ.

С 7 по 10 октября в ЛИТ ОИЯИ проходила Всероссийская научная конференция RCDL'2008: «Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции» — юбилейная в 10-летнем цикле ежегодных российских конференций. В представленных сообщениях подводился своеобразный итог достижений по указанной проблематике на настоящий момент с акцентом на возможности применения семантического представления информации и знаний в распределенных и гибридных электронных библиотеках и научных коллекциях, онтологического моделирования, интеграции неоднородных ресурсов. Традиционно особое внимание было уделено разработкам по электронным коллекциям, создаваемым в рамках проектов РФФИ и других программ по электронным библиотекам. Совместно с RCDL'2008 проводился и специализированный Российский семинар по оценке методов информационного поиска РОМИП'2008, на котором были представлены доклады разработчиков алгоритмов и специалистов-аналитиков известных фирм: Яндекс, Mail.ru, Галактика Софт, KM.RU, Head-Hanter и др.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Adam Gh et al. // Proc. of the 3rd Intern. Conf. «Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education, GRID-2008». Dubna: JINR, 2008. P. 283–286.
2. Korenkov V., Uzhinskiy A. // Open Systems. 2008. V. 2. P. 52–56.
3. Soloviev A. G. et al. JINR Commun. E10-2008-2. Dubna, 2008.
4. Soloviev A. G.
<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/gluplot/indexe.html>
5. Иванов В. В. и др. Сообщение ОИЯИ P10-2008-152. Дубна, 2008.
6. Акишин П. Г. и др. Сообщение ОИЯИ P11-2008-149. Дубна, 2008.
7. Kapishin M. et al. // Diffractive Working Group Meeting, July 1, 2008;
<https://www-h1.desy.de/icgi-h1/wiki/moin.cgi>
DiffractiveWorkingGroup/DiffractiveMeeting2008-07-01
8. Palichik V. // CMS Week, Des. 8, 2008; <http://indico.cern.ch/contributionDisplay.py?contribId=10&confId=46650>
9. Blaschke D. B., Grigorian H., Kalinovsky Yu. L. // arXiv:0808.1705. 2008; Phys. Rev. C (submitted).
10. Chuluunbaatar O. et al. // Comp. Phys. Commun. 2008. V. 179. P. 685–693;
Chuluunbaatar O. // Vestn. RUPF: Ser. Math. Inform. Phys. 2008. V. 2. P. 40–56;
Chuluunbaatar O. et al. // Comp. Phys. Commun. 2008. V. 178. P. 301–330;
Chuluunbaatar O. et al. // Phys. Rev. A. 2008. V. 77. P. 034702-1–034702-4;
Chuluunbaatar O. et al. // Phys. At. Nucl. 2008. V. 71. P. 844–852.
11. Saha B., Visinescu M. // Astrophys. and Space Sci. 2008. V. 315. P. 99–104.
12. Saha B., Rikhvitsky V. // J. Math. Phys. 2008. V. 49. P. 112502.
13. Lukyanov K. V. et al. // Bul. of the RAS: Physics. 2008. V. 72. P. 854–858.
14. Brandt R. et al. // Part. Nucl. 2008. V. 39, No. 2. P. 259–285;
Brandt R. et al. // Rad. Meas. 2008. V. 43. P. 132–138.
15. Amirkhanov I. V. et al. // Part. Nucl., Lett. 2008. V. 5, No. 3(145). P. 479–484;
Amirkhanov I. V. et al. // Materials and Structures. 2008. V. 41. P. 335–344.
16. Амирханов И. В. и др. // Ядерная физика и нанотехнологии: ядерно-физические аспекты формирования, изучения и применения наноструктур. Дубна, 2008. С. 339–349.
17. Yukalov V. I., Yukalova E. P. // J. Phys. Conf. Ser. 2008. V. 104. P. 012003-11;
Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Laser Phys. Lett., DOI: 10.1002/lapl.200810111.
18. Meletemov H., Boyadjiev T. JINR Preprint E11-2008-143; Lect. Notes in Comp. Sci. (submitted).
19. Иванов В. В. и др. // Ядерная физика и нанотехнологии: ядерно-физические аспекты формирования, изучения и применения наноструктур. Дубна, 2008. С. 293–311.
20. Suzko A. A., Schulze-Halberg A. // Phys. Lett. A. 2008. V. 372. P. 5865–5871;
Suzko A., Tralle I. // Acta Physica Polonica B. 2008. V. 39, No. 3. P. 545–567.
21. Adam Gh., Adam S. // J. Optoelectronics and Adv. Mater., 2008. V. 10, No. 7. P. 1666–1670.
22. Gerd V. P. // Acta Appl. Math. 2008. V. 101. P. 39–51.
23. Gerd V. P., Khvedelidze A. M., Palii Yu. G. // Theor. Math. Phys. 2008. V. 155(1). P. 557–566;
Palii Yu. G., Khvedelidze A. M. // Program. and Comp. Software. 2008. V. 34, No. 2. P. 101–106.
24. Korniyak V. V. // Ibid. P. 84–94.
25. Jameson P., Khvedelidze A. // Phys. Rev. A. 2008. V. 77. P. 053403.
26. Zemlyanaya E. V. et al. // J. of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techn. 2008. V. 2, No. 6. P. 884–889.
27. Hristov I., Dimova S., Boyadjiev T. JINR Preprint E11-2008-160; Lect. Notes in Comp. Sci. (submitted).