



# ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

В 2013 г. Лабораторией информационных технологий в рамках направления «Сети, компьютеринг, вычислительная физика» проводились исследования по двум темам первого приоритета: «Информационное, компьютерное и сетевое обеспечение деятельности ОИЯИ» и «Математическая поддержка теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ». В рамках взаимодействия с другими лабораториями ОИЯИ сотрудники ЛИТ принимали участие в исследованиях по 25 темам Проблемно-тематического плана научно-исследовательских работ.

Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ (ЦИВК ОИЯИ) является крупнейшим центром RDIG (российский грид для интенсив-

ных операций с данными) в составе глобальной грид-инфраструктуры WLCG/EGEE/EGI, который обеспечивает поддержку виртуальных организаций международных проектов, в том числе экспериментов на ЛНС. В 2013 г. в ОИЯИ было выполнено около 5 млн задач, затраты процессорного времени при этом составили более 130 млн ч в единицах NEP-Spec06. Сайт ОИЯИ — один из наиболее эффективных сайтов уровня Tier-2 в инфраструктуре WLCG (Worldwide LHC Computing Grid).

В 2013 г. на базе ЦИВК ОИЯИ в Лаборатории информационных технологий создан прототип центра обработки данных для эксперимента CMS уровня Tier-1.

## СЕТЕВАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ

В 2013 г. продолжены работы, связанные с развитием и обеспечением надежного функционирования сетевой и информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ. Основными элементами этой инфраструктуры являются телекоммуникационные каналы связи, локальная вычислительная сеть (ЛВС), ЦИВК и базовое программное обеспечение, в том числе на основе грид-технологий, объединяющее информационно-вычислительные ресурсы Института в единую, доступную для всех пользователей среду.

**Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ.** В 2013 г. поддерживалась надежная работа высокоскоростного канала связи Дубна–Москва. Для связи с научными сетями и сетью Интернет использовались следующие каналы связи: ЦЕРН (10 Гбит/с), RBnet (10 Гбит/с), московские научные сети (10 Гбит/с), RUNet (10 Гбит/с), RadioMSU (10 Гбит/с), E-арена (10 Гбит/с). В 2013 г. пропускная способность резервного канала связи была увеличена до 10 Гбит/с.

Распределение входящего и исходящего трафика по подразделениям ОИЯИ в 2013 г. (превышаю-

щего по входящему трафику 3 Тбайта) приведено в табл. 1.

Таблица 1

Подразделение	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт
ЛИТ	79,40	42,95
ЛФВЭ	65,93	47,59
ЛЯП	60,08	153,07
ЛНФ	34,28	88,31
Управление	17,07	66,57
ЛТФ	15,23	15,3
Узел удаленного доступа (VPN)	14	2,65
Университет «Дубна»	11,99	16,42
ЛЯР	11,87	2,68
ГРК	11,57	1,54
ЛРБ	9,56	1,69
ОАО «НПК Дедал»	5,99	0,583
Санаторий-профилакторий «Ратмино»	3,25	1,51

Таблица 2

Научно-образовательные цели	Файлообмен (torrent, ftp)	Веб-ресурсы	Социальные сети	Мультимедиа	Программное обеспечение	Обмен с сетями Дубны
91 %	6,98 %	1,24 %	0,69 %	0,06 %	0,03 %	0,0 %

Общий входящий трафик ОИЯИ, включая серверы общего доступа, Tier-1 и ЦИВК, составил в 2013 г. 2656,35 Тбайт. Процентное распределение входящего трафика по категориям приведено в табл. 2.

**Локальная вычислительная сеть (ЛВС) ОИЯИ.** В 2013 г. были продолжены работы, связанные с дальнейшим улучшением характеристик сети ОИЯИ и предоставлением пользователям дополнительных возможностей. Введена в эксплуатацию 10-гигабитная магистраль ОИЯИ: все лаборатории и подразделения подключены посредством 10-гигабитных коммутаторов Cisco Catalyst 3560E-12D к 10-гигабитной оптической сети Института. Проработана технология виртуальной платформы для сетевых серверов с набором стандартных сервисов сетевого управления ОИЯИ на базе серверов фирмы SuperMicro и коммутаторов InfiniBand. В рамках поддержки пользователей ЛВС расширены возможности почтового и проху-сервисов. Сервис авторизации центрального вычислительного комплекса ОИЯИ переведен на LDAP-регистрацию, и проработаны решения по переводу других сервисов ОИЯИ на авторизацию с единым паролем доступа. В 2013 г. введена в эксплуатацию VoIP-телефония с возможностью гололевой связи с ОИЯИ из любой точки мира. Запущен в работу JINR Content Server, что позволило завершить создание системы видеоконференций с возможностью записи и воспроизведения потокового видео в режиме реального времени.

ЛВС ОИЯИ содержит 7368 сетевых элементов и 11593 IP-адреса. На 2013 г. зарегистрировано 3884 пользователя сети, более 1500 пользователей сервиса mail.jinr.ru, 1301 пользователь электронных библиотек и 864 пользователя сервиса удаленного доступа.

**Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ.** В настоящее время вычислительная ферма ЦИВК состоит из 2560 64-битных процессоров и системы хранения данных общей емкостью 1800 Тбайт. Центральный маршрутизатор сети ЦИВК соединен с основным маршрутизатором сети ОИЯИ на скорости 10 Гбит Ethernet.

Разработан проект модернизации системы электроснабжения и прецизионного кондиционирования ЦИВК ОИЯИ, реализация которого начнется в первом квартале 2014 г.

Вычислительные средства и системы хранения информации управляются базовым программным

обеспечением, позволяющим использовать ресурсы ЦИВК как в международных проектах для распределенных вычислений (WLCG, FUSION, BIOMED, HONE, PANDA, CBM, BES, NICA/MPD и др.), так и локальными пользователями ОИЯИ.

Базовой операционной системой для ЦИВК является ОС Scientific Linux SL6 с архитектурой x86\_64. На ЦИВК установлен набор свободно распространяемых компиляторов для различных языков программирования (C, C++, FORTRAN и др.), считающихся стандартными компиляторами для Unix-подобных операционных систем. Компиляторы Intel дополнены эффективными средствами разработки многопоточного кода, поддерживающими стандарт OpenMPI. Для разработки параллельных программ с использованием пакета MPI (Message Passing Interface) установлены библиотеки MPI для языков программирования C, C++ и FORTRAN.

Специальный сервер и рабочие узлы кластера обеспечивают пакетную обработку заданий как запущенных с интерактивных машин локальными пользователями, так и получаемых из глобальной среды WLCG. Сервис X509 PX (ProXy) хранит и обновляет сертификаты пользователей для защиты ресурсов и задач пользователей в грид-системах. Это основной метод контроля зарегистрированных пользователей в проекте WLCG. На кластере поддерживается распределенная файловая система CVMFS (CernVM File System), обеспечивающая доступ к программному обеспечению коллабораций ALICE, ATLAS, CMS, LHCb и BES, которое установлено на серверах в ЦЕРН. Два VObox (Virtual Organization box) используются коллаборациями ALICE и CMS для обеспечения своей работы на сайтах WLCG.

Системы хранения и доступа к данным dCache и XROOTD обеспечивают работу с данными как для локальных пользователей ОИЯИ, так и для внешних пользователей. Две инсталляции системы доступа к данным XROOTD поддерживают работу с данными международных коллабораций ALICE и PANDA. Все системы хранения построены с использованием аппаратного механизма защиты данных RAID6.

В состав ЦИВК входят несколько специализированных машин для поддержки локальных и международных коллабораций пользователей: проекты NICA/MPD и PANDA.

В табл. 3 приведена статистика использования ЦИВК в 2013 г. подразделениями Института и группам пользователей, за исключением пользователей грид-среды.

Таблица 3

Лаборатория/ группа	Число заданий	Процессорное время, kSi2K·ч	Астрономи- ческое время, kSi2K·ч
MPD	1390015,86	1399986,59	64770
ЛРБ	972527,78	96827,22	1158
ЛТФ	835919,13	793977,43	7190
ЛИТ	454857,09	86331,86	1713
ЛЯП	363724,39	218444,15	8917
COMPASS	193236,73	195613,12	8764
ЛФВЭ	187185,90	196224,81	3952
BES	110510,37	116310,71	35680
ЛНФ	71114,43	71436,82	352
ЛЯР	20127,82	414,77	25
PANDA	1660,02	14308,12	94688

**Грид-среда ОИЯИ.** В 2013 г. продолжалась активная работа в рамках крупномасштабных грид-проектов: «Всемирный вычислительный грид для LHC» (WLCG, <http://lcg.web.cern.ch/LCG/>), «Европейская грид-инфраструктура» (EGI-InSPIRE — Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe, <http://www.egi.eu/projects/egi-inspire/>). ЦИВК ОИЯИ как грид-сайт JINR-LCG2 глобальной грид-инфраструктуры поддерживает вычисления восьми виртуальных организаций (alice, atlas, biomed, cms, dteam, fusion, hone, lhcb), а также предоставляет возможность использования грид-ресурсов для экспериментов BES и PANDA.

Следует отметить, что грид-сайт ОИЯИ (T2\_RU\_JINR) является центром 2-го уровня в глобальной компьютерной инфраструктуре CMS и одним из восьми грид-сайтов этой структуры в рамках коллаборации RDMS CMS. По всем своим показателям и объему предоставляемых ресурсов и сервисов Tier-2 центр CMS в ОИЯИ соответствует требованиям, предъявляемым на настоящий момент для вычислительных Tier-2 центров CMS, что дает возможность как моделирования физических данных, так и полноценного физического анализа реальных данных на ресурсах вычислительных центров ОИЯИ в полном соответствии с процедурами, принятыми в глобальной грид-инфраструктуре эксперимента CMS [1].

На базе ЦИВК ОИЯИ в Лаборатории информационных технологий создан прототип центра уровня Tier-1 для эксперимента CMS. Центр Tier-1 будет использоваться как часть глобальной системы обработки экспериментальных данных и данных моделирования событий, поступающих из центра уровня Tier-0 (ЦЕРН), а также центров уровней Tier-1 и Tier-2, глобальной грид-системы LHC-WLCG для эксперимента CMS [2]. В настоящий момент прототип Tier-1 состоит из 1200 64-битных процессоров, системы хранения объемом 660 Тбайт и ленточной системы хранения на 72 Тбайта. В ближайшее время система хранения будет расширена на 2000 Тбайт.

Для обслуживания грид-сайта в ОИЯИ установлено 22 сервера с ПО промежуточного уровня EMI2/EMI3 проекта WLCG. Кроме функций поддержки работы самого сайта JINR-LCG2 часть серверов реализует важные сервисы и функции поддержки российского грид-сегмента проекта WLCG. В табл. 4 приведены данные по использованию в 2013 г. грид-инфраструктуры ЦИВК ОИЯИ виртуальными организациями, входящими в RDIG/WLCG/EGI.

Таблица 4

ВО	Процессорное время, HEPspec06·ч	Число заданий
atlas	46 784 736	2 727 612
cms	33 328 168	903 071
alice	24 070 600	665 274
lhcb	23 180 600	225 182
biomed	2 214 388	263 086
bes	420 768	42 727
hone	338 352	21 548
fusion	307 160	17 930
ops	1 148	113 897
Bcero	130 645 920	4 980 327

В 2013 г. продолжены работы по моделированию системы хранения и обработки данных ускорительного комплекса NICA. В качестве платформы для имитационной модели выбрана система GridSim. Созданная система моделирования позволяет проводить разнообразные эксперименты с исследуемым объектом, не прибегая к физической их реализации. В процессе моделирования можно подобрать минимально необходимое оборудование, обеспечивающее потребности передачи, обработки и хранения данных, оценить необходимый запас производительности оборудования, обеспечивающего возможное увеличение производственных потребностей, выбрать несколько вариантов оборудования с учетом текущих потребностей и перспективы развития в будущем, провести проверку работы системы, выявить ее «узкие» места и т. д. [3].

Предложен и реализован современный подход к созданию «облачных» автономных грид-инфраструктур, предназначенных для решения различных задач в области «облачных» и грид-технологий [4]. Проведение исследований, разработок, тестирования и обучения в области грид-технологий на производственных грид-инфраструктурах менее эффективно с точек зрения скорости достижения результата и использования аппаратных ресурсов, чем решение аналогичных задач на специализированных комплексах. Более того, часть перечисленных выше задач на производственных грид-инфраструктурах решить вообще невозможно. На основе разработанного подхода создан специализированный «облачный» программно-аппаратный комплекс в составе ЦИВК ОИЯИ.

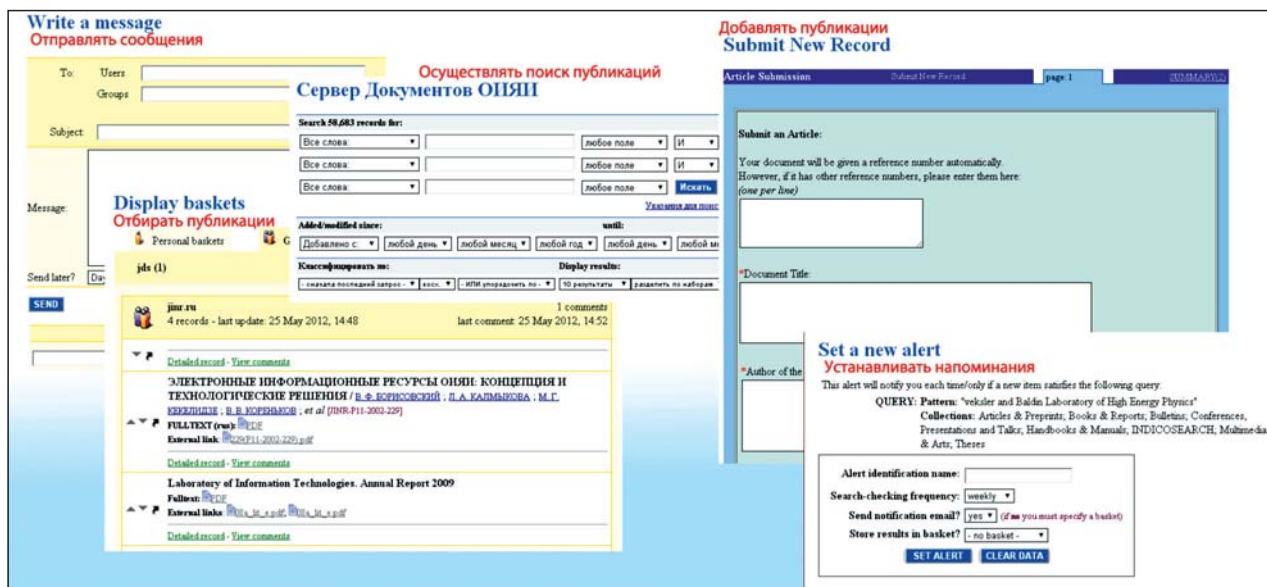


Рис. 1. Пользовательский интерфейс репозитория научных публикаций JDS. Он позволяет осуществлять поиск публикаций, отбирать публикации в «корзины», отправлять сообщения другим пользователям, устанавливать напоминания и т. д.

### Информационная и программная поддержка.

В 2013 г. продолжены работы по модернизации, наполнению информацией и разработке средств визуализации для представления результатов поиска в репозитории научных публикаций и документов ОИЯИ JINR Document Server (JDS), <http://jds.jinr.ru>, созданного в рамках Open Access Initiative на базе программного обеспечения CDS Invenio (рис. 1). Одной из целей создания JDS является обеспечение механизма оценки эффективности научной деятельности сотрудников института. Для этого разрабатываются новые приложения для JDS с использованием методов визуализации информации и сбора статистических данных, позволяющие повысить эффективность использования JDS и проводить оценку научной деятельности [5].

Проведен пилотный проект по совместной эксплуатации информационной системы ADB2 (ОИЯИ) и ART EVM (ЦЕРН) для управления проектом NICA по методу освоенного объема (EVM). В системе ADB2 разработан и введен в эксплуатацию функционал для управления иерархической структурой работ (WBS) проекта NICA, организован учет расходов по проекту в соответствии с утвержденной WBS и подготовлены отчеты для проведения план-факт-анализа финансовых показателей проекта NICA.

В течение 2013 г. продолжены работы по актуализации программной среды, баз данных и содержимого информационных сайтов ЛИТ и ОИЯИ: <http://lit.jinr.ru>, <http://www.jinr.ru>, <http://wwwinfo.jinr.ru> и др. Осуществлялось сопровождение и модернизация баз данных административно-хозяйственного профиля (совместно с НТО АСУ ОИЯИ). Для Управления ОИЯИ разработана и подготовлена к тестированию

и запуску в опытную эксплуатацию «Система интерактивного формирования проблемно-тематического плана научной организации (на примере ОИЯИ)».

В 2013 г. активно велись работы по созданию и хранению электронных документов, связанных с научной и административной деятельностью ЛИТ и Института — по представлению Научно-организационного отдела ОИЯИ (информация о работе базовых установок, о сессиях Ученого совета ОИЯИ и многое другое), организация Интернет-доступа к ним. Традиционно велись разработки, создание и поддержка специализированных информационных веб-сайтов, сайтов различных конференций, совещаний, симпозиумов (ЛНФ им. И. М. Франка — RCM-3, ЛЯП им. В. П. Джеллепова — RCRC-2014, ЛЯР им. Г. Н. Флерова — EXON-2014, ЛИТ — RCDL-2014), а также выполнена организация хостинга веб-сайтов по заявкам организаторов (сайт издательского отдела ОИЯИ, еженедельника «Дубна» и др.) и заявкам Лабораторий ОИЯИ: ЛНФ им. И. М. Франка (ISINN), ЛЯР им. Г. Н. Флерова (IASEN-2013), ЛФВЭ им. В. И. Векслера и А. М. Балдина (по проекту E&T–RAW) и др.

Бурное развитие технологий программирования параллельных вычислений, в частности MPI, нашло свое отражение и в библиотеке программ JINRLIB. Была сформулирована следующая стратегия распараллеливания: библиотечная программа, подготовленная для работы в среде MPI, должна успешно работать при любом количестве NP параллельных процессов, вовлекаемых в решение прикладной задачи. Эта идея была успешно реализована при распараллеливании ряда программ библиотеки JINRLIB.

Кроме того, были проведены работы по реконструкции сайта библиотеки: изменен дизайн, добавлен новый раздел для программ с использованием техно-

логии MPI. Для улучшения качества статистики использования программ кроме счетчика посещений страницы добавлен счетчик количества скачиваний.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ, ПРОВОДИМЫХ ОИЯИ

Одним из основных направлений деятельности ЛИТ является обеспечение математической алгоритмической и программной поддержки экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. В 2013 г. по результатам исследований в рамках данного направления сотрудниками ЛИТ было опубликовано 2 монографии, свыше 170 статей, из них 77 — в реферируемых журналах. На международных и российских конференциях представлено 58 докладов. Ниже приведена краткая информация о некоторых из полученных результатов.

В рамках эксперимента ATLAS на базе WebIS реализован сервис WebEmon. Это сервис Web-доступа к Event Monitoring сервиса DAQ ATLAS, реализующий мониторинг сбора событий (raw data events). Предшествующая версия Event Dump могла работать только в среде TDAQ. WebEmon позволяет пользователю, используя HTTP-запросы, получать отдельные события в XML-формате. Для функционирования WebEmon реализован также конвертер событий из формата raw event format в XML. Новый сервис работает в TDAQ ATLAS. В рамках работ по удаленному мониторингу в эксперименте ATLAS разработана новая компонента WEBIS-EXT для обеспечения возможности получения обновлений информации от IS-сервера («subscribe» на информацию), находящегося внутри Point1, через WEB. С начала июля по сентябрь компонента находилась на тестовом WEB-сервере для Point1 в ATLAS. По результатам тестирования она была перенесена на обычный WEB-сервер для Point1 в ATLAS.

Для эксперимента CMS в рамках группы DPG (Detector Performance Group) по катодно-стриповым камерам CSC (сотрудник ЛИТ В.В.Пальчик является соруководителем этой группы) на данных протон-протонных столкновений проведена оценка эффективности локальной реконструкции и пространственного разрешения CSC. Разработан новый алгоритм реконструкции трек-сегментов в CSC. Результаты работ неоднократно докладывались на совещаниях CMS и международных конференциях.

Для эксперимента CBM (Дармштадт, Германия) разработана общая структура геометрической базы данных эксперимента. Реализована программа для

осуществления конвертации геометрии магнита в разработанную базу данных. Создан User Requirements Document для компонентной базы данных.

Исследована возможность регистрации распадов  $J/\psi \rightarrow e^+e^-$ , рождающихся в AuAu-соударениях при энергии пучка 25 ГэВ/нуклон на установке CBM. Для выделения сигнальных событий в условиях доминирующего фона разработаны специальные критерии отбора и подобрана оптимальная толщина мишени. Предложена эффективная методика определения критических границ для указанных критериев отбора. Показано, что используемые критерии позволяют надежно и с высокой скоростью осуществить набор приемлемой статистики распадов  $J/\psi \rightarrow e^+e^-$  [6].

В приближении эффективной массы для электронных (или дырочных) состояний сфероидальных квантовых точек при наличии внешних полей построены схемы теории возмущений в рамках метода Канторовича и адиабатического метода. Собственные значения и собственные функции, полученные как в аналитическом, так и в численном виде, применяются для анализа спектральных и оптических характеристик сфероидальных квантовых точек в однородном электрическом поле [7].

Проведено исследование эволюции перепутанности спинов двух тяжелых составляющих связанного состояния, движущегося в сильном лазерном поле, в рамках квазиклассического приближения. Движение связанного состояния как целого рассматривалось классическим образом с использованием точного решения уравнений движения Ньютона, полученного вне рамок стандартного дипольного приближения, с полным учетом эффектов магнитного поля. В то же время эволюция спинов составляющих под действием лазерного поля описывалась квантово-механически. Спиновая матрица плотности определялась как решение уравнений фон Неймана с эффективным гамильтонианом, описывающим спин-лазерное взаимодействие вдоль классической траектории связанного состояния. На основании полученного решения была рассчитана эволюция конкуренции (concurrency) спинов, находящихся изначально в некоррелированном либо в максимально перепутанном состоянии Вернера [8].

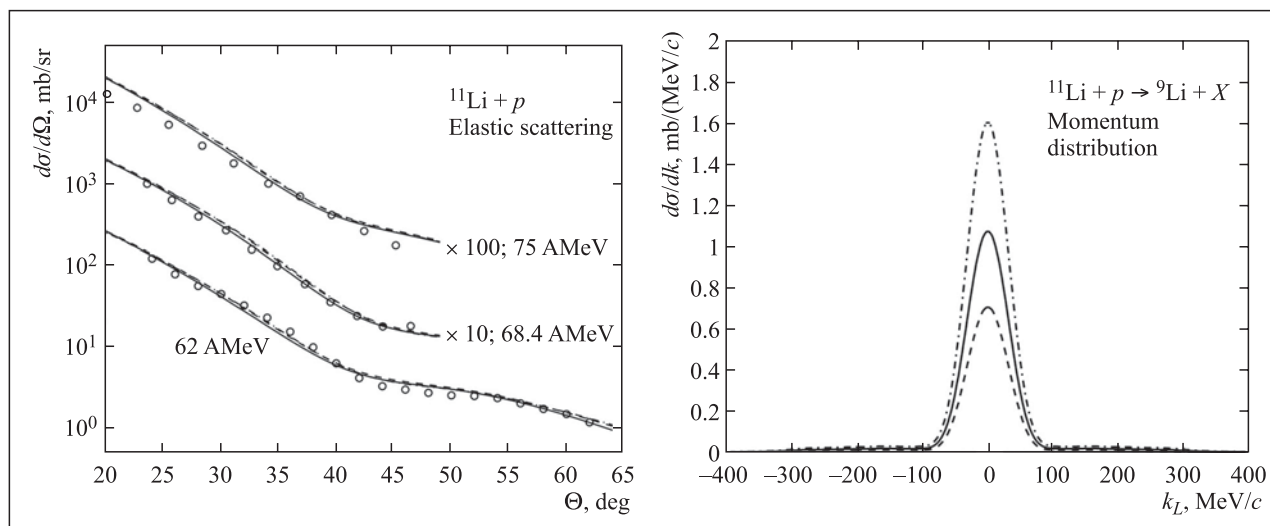


Рис. 2. Слева: дифференциальные сечения упругого рассеяния  $^{11}\text{Li} + p$ . Расчеты с использованием двух форм плотности  $^{11}\text{Li}$ , полученных в рамках модели DCM (Dynamical Cluster Model) (сплошная линия) и в рамках модели LSSM (Large Scale Shell Model) (штриховая линия). Справа: предсказания распределений импульсов фрагментов  $^9\text{Li}$  в реакции распада  $^{11}\text{Li} + p \rightarrow ^9\text{Li} + X$  в кластерной модели DCM

Проведено исследование процессов рассеяния и распада  $^{11}\text{Li}$  на протонах при энергиях 60–80 МэВ/нуклон на основе гибридной модели микроскопического оптического потенциала. Показано, что в рамках данного подхода удается воспроизвести экспериментальные данные по упругому рассеянию. Исследовано влияние спин-орбитального потенциала на согласие с экспериментальными данными. Сделаны предсказательные расчеты полных сечений реакции и импульсных распределений продуктов распада  $^{11}\text{Li}$ . На основе динамической двух-кластерной модели  $^{11}\text{Li}$  построена одночастичная плотность этого ядра [9]. Результаты расчетов представлены на рис. 2.

Разработана MPI-реализация метода 2D- и 3D-расчетов эволюции температурных полей и динамики фазовых переходов, возникающих в материалах при облучении тяжелыми ионами высоких энергий и импульсными ионными пучками. Для описания теплофизических процессов используется модифицированная модель термического пика, в основе которой лежит система двух связанных уравнений теплопроводности, описывающих тепловые процессы в электронной и ионной подсистемах облучаемой мишени. Численное решение этих уравнений осуществляется в цилиндрической системе координат как в аксиально-симметричном случае (2D), так и с учетом нарушения этой симметрии (3D). Моделирование динамики фазовых переходов реализовано на основе задачи Стефана в рамках энтальпийного подхода. Показано, что результаты численного моделирования согласуются с известными экспериментальными оценками размеров треков, образующихся в облучаемых тяжелыми ионами образцах [10].

Проведено моделирование процессов соударения нанокластеров с металлической твердой поверхностью методом молекулярной динамики, исследованы зависимости глубины проникновения атомов нанокластера в материал от энергии налетающих частиц в пучке, размера нанокластеров и частоты импульсного источника нанокластеров. Исследована зависимость толщины поверхностного слоя с новой структурой, который образуется в результате облучения материала наночастицами, от перечисленных выше параметров пучка налетающих нанокластеров. Обнаружена зависимость глубины проникновения атомов кластера в материал мишени и толщины осаждаемого слоя от количества атомов в налетающих кластерах, частоты импульсного источника в случае облучения пучками кластеров. Показано, что существует зависимость характеристик различных энергетических режимов (soft landing, droplet spreading и implantation) от числа атомов в налетающих кластерах. Исследованные проблемы могут представлять интерес для получения материала поверхностного слоя с новыми физическими и химическими свойствами, существенно отличающимися от свойств основного материала [11].

Представлены теоретически полные кинематические расчеты и эксперименты для реакции захвата  $\text{H}^+ + \text{He}$  с ионизацией иона мишени при энергии протона 630 кэВ. Экспериментальные результаты дают максимально достижимое дифференциальное сечение, что позволяет наиболее детально протестировать теорию. Выполненные оценки позволяют идентифицировать вклад механизма встряски и механизма последовательного выбивания электронов в данной реакции. Также показано, что дифферен-

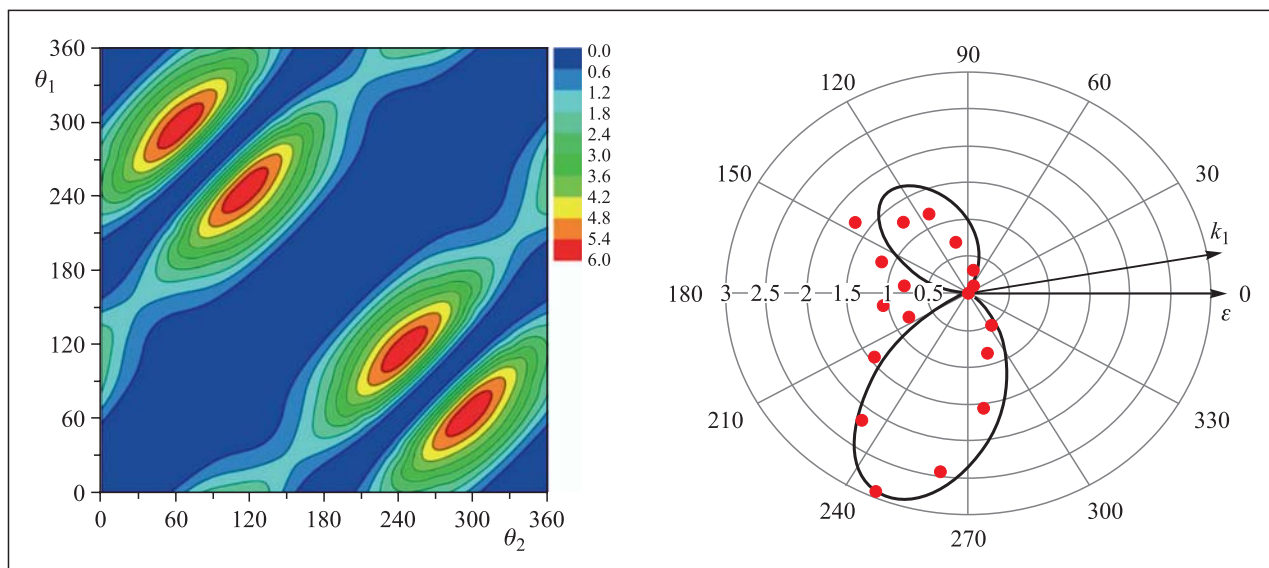


Рис. 3. Результаты численного моделирования полного дифференциального сечения двойной фотоионизации молекулы азота в плоскости углов рассеяния (слева) и сравнение теоретических предсказаний с экспериментальными данным (справа)

циальное сечение процесса захвата с одновременной ионизацией иона чрезвычайно чувствительно к качеству пробной волновой функции гелия [12].

Рассчитано дифференциальное сечение рассеяния двукратной фотоионизации молекулы азота с детектированием вылетающих электронов на совпадение. Рассмотрены случаи фиксированной и произвольной ориентации межъядерной оси. Состояние вылетающих электронов описывается коррелированным произведением двух двуцентровых кулоновских функций континуума, точно удовлетворяющих асимптотическим условиям. Для проверки выбранного подхода рассчитаны сечения двукратной фотоионизации молекулы водорода, для которой доступны обширные экспериментальные и теоретические данные. Результаты расчетов на водороде демонстрируют влияние электронных корреляций в мишени (рис. 3). В случае азота рассмотрена только ионизация  $^3\sigma_g$ -орбитали, в результате которой ион  $N_2^+$  оказывается в  $^1\sigma_g$ -состоянии. Случай близлежащего  $^3\pi_u$ -состояния с открытой конфигурацией планируется рассмотреть в последующих работах. Полученные результаты подтверждают свойства симметрии дифференциального сечения рассеяния и предсказывают оптимальные значения углов вылета электронов. Также проведено сравнение с результатами, полученными с помощью метода параметризации гауссовыми функциями [13].

Разработана математическая модель репарации ошибочно спаренных оснований ДНК в бактериальных клетках *Escherichia coli*. На основании современных экспериментальных данных количественно описаны ключевые пути реализации этого механизма. Детально прослежены пять основных путей удаления ошибок с участием разных ДНК-экзонуклеаз. Развитая модель найдет широ-

кое применение к проблеме изучения радиационно-индуцированного мутагенеза [14].

Для решения системы линейных алгебраических уравнений предложен непрерывный аналог метода Ньютона с внутренней итерацией. Реализация внутренних итераций производится двумя способами. Первый способ предполагает установить число внутренних итераций заранее, а второй связан с использованием неточного метода Ньютона для решения линейной системы уравнений, которая возникает на каждой стадии внешних итераций. Предложено несколько новых способов выбора итерационного параметра и усиливающего члена, которые гарантируют сходимость итераций. Метод с внутренней итерацией имеет квадратичную сходимость, и поэтому он может конкурировать с другими итерациями типа релаксации с оптимальным параметром релаксации для строго диагонально доминирующей системы. Более того, предложенный метод применим не только для системы со строго диагональной доминирующей матрицей, но и для системы, матрица которой не эрмитова и не положительно определена [15]

Разработаны две новые разностные схемы повышенной точности для численного решения начально-краевой задачи уравнения Бюргерса. Уравнение Бюргерса является одномерным аналогом уравнения Навье–Стокса, описывающего динамику жидкости, и обладает всеми его математическими свойствами. Кроме того, уравнение Бюргерса относится к числу немногих нелинейных уравнений в частных производных, для которых известно аналитическое решение, что позволяет использовать его в качестве тестовой модели для сравнения свойств различных численных методов. Первая схема, предназначенная для численного решения уравнения теплопроводности, имеет шестой порядок аппроксимации по простран-

ственной переменной и третий порядок по временной переменной. Вторая схема используется для нахождения численного решения уравнения Бюргерса на основе связи между уравнением теплопроводности и уравнением Бюргерса. Данная схема также имеет шестой порядок аппроксимации по пространственной переменной. Полученные на тестовых примерах численные результаты хорошо согласуются с аналитическими решениями уравнения Бюргерса и подтверждают порядок аппроксимации предложенных схем [16].

Разработан граничный метод взвешенных невязок с разрывными базисными функциями для реше-

ния с высокой точностью ряда линейных эллиптических краевых задач относительно скалярных или векторных функций, который является обобщением метода наименьших квадратов с  $t$ -элементами. Полученные проекционно-сеточные схемы в скалярном случае точны для двумерных и трехмерных многочленов до седьмой степени включительно, а в векторном случае точность обеспечивается для многочленов до шестой степени включительно. На примерах некоторых модельных двумерных и трехмерных линейных задач магнитостатики показана высокая скорость  $hp$ -сходимости приближенных решений [17].

## МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

Исследования и работы ЛИТ ведутся в тесном сотрудничестве с учеными и специалистами стран-участниц ОИЯИ и многих научных центров других стран. Отметим некоторые примеры такого сотрудничества.

Совместно с коллегами из Германии разработана двумерная численная модель с учетом нелинейных свойств материалов для исследования распределений тока и магнитного поля, а также для вычисления потерь в сверхпроводниках на основе метода конечных элементов и программного пакета Comsol Multiphysics. Развита модель была успешно применена для проектирования и сборки сверхпроводящих кабелей сложной конфигурации [28].

В сотрудничестве с болгарскими коллегами проведено численное исследование комплексов локализованных структур в двух динамических системах, описываемых нелинейным уравнением Шредингера с внешней накачкой и диссипацией (NLS) и уравнением двойного синус-Гордона (2SG). Численный анализ основан на продолжении соответствующих стационарных решений по параметрам и численном решении линеаризованной задачи на собственные значения для анализа устойчивости и бифуркаций. Мультисолитонные комплексы NLS исследованы для случая слабой и нулевой диссипации. Свойства мультифлюксонных решений 2SG проанализированы в зависимости от параметра второй гармоники [19].

В сотрудничестве с румынскими коллегами проведено исследование анизотропной недиагональной модели пространства–времени Бианки типа II, VIII, IX, и показано, что недиагональные компоненты соответствующей метрики вводят жесткие ограничения на компоненты тензора энергии импульса в целом. Петлевая квантовая космология струнной космологической модели типа Бианки II в присутствии однородного магнитного поля рассмотрена в [20].

Совместно с французскими коллегами проведено исследование связанной динамики низколежащих мод и ядерных гигантских резонансов с помощью метода моментов функции Вигнера на основе зависящего от времени уравнения Хартри–Фока в модели гармонического осциллятора со спин-орбитальным потенциалом плюс квадруполь-квадрупольное и спин-спиновое остаточное взаимодействие. Проанализированы новые низколежащие зависящие от спина моды. Особое внимание уделено спиновой ножничной моде [21].

Совместно с французскими коллегами проведено исследование связанной динамики низколежащих мод и ядерных гигантских резонансов с помощью метода моментов функции Вигнера на основе зависящего от времени уравнения Хартри–Фока в модели гармонического осциллятора со спин-орбитальным потенциалом плюс квадруполь-квадрупольное и спин-спиновое остаточное взаимодействие. Проанализированы новые низколежащие зависящие от спина моды. Особое внимание уделено спиновой ножничной моде [21].

## СОВЕЩАНИЯ, КОНФЕРЕНЦИИ

При поддержке Объединенного института ядерных исследований и Европейской организации ядерных исследований с 22 по 26 апреля 2013 г. в ОИЯИ прошла четвертая школа по информационным технологиям «Грид и административно-управленческие системы ЦЕРН». Организаторами являлись Лаборатория информационных технологий и группа разработки современных информационных систем департамента основной инфраструктуры ЦЕРН. Цель школы — передача знаний, накопленных и развиваемых в ОИЯИ и ЦЕРН в области современных информационных технологий для подготовки кадров.

Четвертая школа была посвящена вопросам управления сложными научными комплексами и информационными системами на примере разрабатываемых технологий в ОИЯИ и ЦЕРН. В школе приняли участие более 50 студентов ведущих высших учебных заведений Москвы и Московской области: МИФИ, МФТИ, МЭИ, МГТУ им. Н. Э. Баумана, МУПОиЧ «Дубна», а также студенты из Польши — Университет науки и технологии, Краков.

Традиционное двухдневное рабочее совещание по компьютерной алгебре проходило в ЛИТ ОИЯИ 21–22 мая. В нем приняли участие более 30 уче-



ных из университетов и научных центров Бухареста (Румыния), Москвы, Санкт-Петербурга, Иванова и Дубны. Было представлено 28 докладов.

С 8 по 12 июля в Лаборатории информационных технологий проходила очередная, седьмая по счету, международная конференция «Математическое моделирование и вычислительная физика» (ММСР'2013). Соорганизаторами этой конференции выступили ЛИТ ОИЯИ, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук, Технический университет и Университет им. П. Й. Шафарика (Кошице, Словакия). Научная программа конференции была посвящена применению распределенных и параллельных вычислений в науке и технике, математическим методам и средствам моделирования сложных систем, вычислительной биофизике, химии и биоинформатике, математическим методам и программам обработки экспериментальных данных, методам и программам компьютерной алгебры, квантовым вычислениям и их приложениям. В работе конференции приняли участие более 200 ученых и специалистов из 13 стран и большого числа российских научных центров и университетов. Всего же на конференции было заслушано 34 пленарных, свыше 120 секционных и 25 стендовых докладов. Следует особо подчеркнуть,

что большое количество совместных работ, выполненных сотрудниками ЛИТ с учеными из различных научных центров стран-участниц ОИЯИ, свидетельствует о значимости проводимых в ЛИТ исследований и интересе к ним, проявляемом исследователями в странах-участницах.

С 9 по 16 сентября в Варне проходил традиционный, 24-й, симпозиум по ядерной электронике и компьютерингу — NEC'2013, организованный совместно ОИЯИ, ЦЕРН и ИЯИЭЭ БАН (София). Данный симпозиум был юбилейным, так как в 2013 г. исполнилось 50 лет с момента проведения первого симпозиума, который состоялся в 1963 г. в Будапеште. В работе симпозиума приняло участие около 100 ученых из 13 стран. Участие молодых ученых было поддержано финансово за счет специальных грантов, выделенных дирекциями ЦЕРН и ОИЯИ. Спонсорскую поддержку проведения симпозиума оказали также компании IBM и Quantum. Отдельная секция в день открытия конференции была посвящена создаваемым новым экспериментальным установкам: проекты ELI-NP, NICA и DRIBs-III. Всего было представлено 54 устных доклада и 33 постерных презентации, из них 19 устных докладов и 17 постеров — сотрудниками ОИЯИ. Молодыми участниками симпозиума были сделаны 13 устных докладов и представлено 11 постеров.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Gavrilov V. et al. // Proc. of XXIV Intern. Symp. on Nuclear Electronics & Computing (NEC'2013). Dubna, 2013. P. 95–100.
- Астахов Н. С. и др. // Информационные технологии и вычислительные системы. 2013. № 4. С. 27–36.
- Кореньков В. В., Нечаевский А. В., Трофимов В. В. // Там же. С. 37–44.
- Кутковский Н. А. // Информатизация образования и науки. 2013. № 4(20). С. 15–29.
- Заикина Т. Н., Филозова И. А. // Труды RCDL 2013. Ярославль: ЯГУ, 2013. С. 128–132; [http://rcdl.ru/doc/2013/paper/s9\\_2.pdf](http://rcdl.ru/doc/2013/paper/s9_2.pdf).
- Дереновская О. Ю., Васильев Ю. О. // Письма в ЭЧАЯ. 2013. Т. 10, № 5(182). С. 694–705.
- Гусев А. А. и др. // ЯФ. 2013. Т. 76, № 8. С. 1090–1112.
- Gerdt V. P. et al. // Topical Issue of Physica Scripta. 2013. V. 153. P. 014026-5.
- Lukyanov V. K. et al. // Phys. Rev. C: Nucl. Phys. 2013. V. 88. P. 034612.
- Амирханов И. В. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 5. С. 73–78.
- Батгэрэл Б., Никонов Э. Г., Пузынин И. В. // Вестн. РУДН. Сер. Математика. Информатика. Физика. 2013. № 4. С. 42–56.
- Schöffler M. S. et al. // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 032715–1–6;
- Schöffler M. S. et al. // Ibid. V. 88. P. 042710–1–7.
- Bulychev A. A. et al. // J. Phys. B. 2013. V. 46. P. 185203–1–9.
- Belov O. V. et al. // J. Theor. Biol. 2013. V. 332. P. 30–41;
- Belov O. V. et al. // Phys. Part. Nucl., Lett. 2013. V. 10. P. 587–596.
- Zhanlav T., Chuluunbaatar O., Ankhbayar G. // Appl. Math. 2013. V. 4. P. 210–216.
- Ulziibayar V., Zhanlav T., Chuluunbaatar O. // Intern. J. Math. Sci. 2013. V. 33. P. 1374–1378.
- Yuldashev O. I., Yuldasheva M. B. // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Ser. «Mathematics. Information Sciences. Physics». 2013. No. 1. P. 90–98.
- Grilli F. et al. // Phys. C: Superconductivity. 2013. V. 495. P. 43–49.
- Zemlyanaya E., Alexeeva N. // Lect. Not. Comp. Sci. 2013. V. 8236. P. 547–554;
- Atanasova P., Zemlyanaya E. // Ibid. P. 189–196.
- Saha B. // Gravitation & Cosmology. 2013. V. 19. P. 65–69; ArXiv:1107.4469v1 [gr-qc];
- Rikhvitsky V., Saha B., Visinescu M. ArXiv: 1312.2385v1.
- Balbutsev E. B., Molodtsova I. V., Schuck P. // Phys. Rev. C. 2013. V. 88. P. 014306(1-18).