

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Главная задача Лаборатории информационных технологий состоит в обеспечении теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ, современными телекоммуникационными, сетевыми, вычислительными и информационными ресурсами. Развитие направления «Сети, компьютеринг, вычислительная физика» представляется особо важным с учетом необходимости дальнейшего развития информационной и вычислительной инфраструктуры для обеспечения деятельности ОИЯИ, а также значительных изменений, происходящих в области информационных технологий.

В 2005 г. программа деятельности ЛИТ определялась двумя темами первого приоритета: «Информационное, компьютерное и сетевое обеспечение деятельности ОИЯИ» (тема 09-6-1048-2003/2007, руководители В. В. Иванов, Г. Адам, В. В. Кореньков) и «Математическая поддержка теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ» (тема 09-6-1060-2005/2007, руководители В. В. Иванов, Г. Адам, П. В. Зрелов). Сотрудники лаборатории участвовали в исследованиях по 16 темам Проблемно-тематического плана на уровне проектов и 16 темам в рамках сотрудничества. Результаты выполненных исследований были

опубликованы в реферируемых журналах, трудах научных конференций и препринтах.

Целый ряд научных проектов, представленных сотрудниками ЛИТ, получил гранты INTAS и Комиссии Европейского сообщества в рамках сотрудничества России и ЕС, а также 13 грантов Российского фонда фундаментальных исследований. Семь проектов нацелены на создание и развитие информационной, вычислительной и телекоммуникационной инфраструктуры, а остальные шесть представляют собой инициативные научные проекты.

В 2005 г. Лаборатория информационных технологий выступила организатором 9-го совещания по компьютерной алгебре «DUBNA-2005» (Дубна, 17–18 мая), 3-го международного совещания «Квантовая физика и коммуникация» (Дубна, 26–30 июня), совещания по текущему состоянию проекта «Дубна-грид» (Дубна, 21 июля) и одним из организаторов XX международного симпозиума по ядерной электронике и компьютерингу «NEC'2005» (Варна, Болгария, 15–20 сентября).

Выпущен третий номер «Информационного бюллетеня ЛИТ» (ОИЯИ, 4-8255, Дубна, 2005; http://lit.jinr.ru/Inf_Bul_3/). Опубликован научный отчет лаборатории за 2004–2005 гг.

СЕТЕВАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ. ГРИД-ТЕХНОЛОГИИ

Задача обеспечения ОИЯИ быстродействующими каналами связи имела своей главной целью создание в 2005 г. канала передачи данных ОИЯИ–Москва с пропускной способностью 1 Гбит/с. Все необходимое оборудование было установлено таким образом, чтобы в начале ноября приступить к тестированию работы канала. Это позволит существенно увеличить

общий сетевой трафик, который в 2005 г., при канале связи ОИЯИ–Москва в 45 Мбит/с, составил 45,88 Тбайт (32,69 Тбайт в 2004 г.) по входному и 41,53 Тбайт (40,22 Тбайт в 2004 г.) по выходному трафику. В табл. 1 приведено распределение трафика по подразделениям ОИЯИ (> 500 Гбайт по входному трафику).

Таблица 1

Потребители	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт	Входящий трафик, %	Исходящий трафик, %
ЛФЧ	9,35	5,64	20,37	13,58
ЛИТ	8,79	8,61	10,16	20,73
ЛЯП	8,51	7,17	18,56	17,28
ЛЯР	5,33	3,75	11,62	9,03
ЛВЭ	3,66	5,09	7,98	12,25
Университет «Дубна»	2,72	2,38	5,92	5,73
ЛТФ	2,19	1,99	4,77	4,79
ЛНФ	2,12	5,17	4,62	12,46
Управление ОИЯИ	0,943	0,191	2,01	0,45
Серверы	0,888	0,495	1,89	1,16

В настоящее время база данных IP-адресов содержит 5335 зарегистрированных элементов локальной вычислительной сети (ЛВС) ОИЯИ (4801 — в 2004 г.).

Систематическая работа по управлению ЛВС выполнялась Центром управления сети (<http://nos.jinr.ru/>). На конец 2005 г. зарегистрировано 3070 пользователей сети и 1021 пользователь в режиме удаленного доступа (DIALUP и VPN). 1070 сотрудников ОИЯИ используют @jinr.ru для отправки электронных сообщений. Ежемесячно расследуется около 15–20 инцидентов, связанных с нарушением безопасности сети, — вирусы, сканирование, взломы и т.п. Ежедневно доставляется приблизительно 30 000 сообщений по электронной почте. Более 200 000 сообщений блокируются как спам, 250–300 ежедневно получаемых сообщений заражены вирусами различного типа.

Локальная сеть ОИЯИ — это сложная распределенная структура, которая состоит из специализированного сетевого программного обеспече-

ния и многофункционального оборудования. Она является базисом распределенной информационно-вычислительной инфраструктуры, на которой функционируют и развиваются самые разнообразные сервисы и приложения, используемые сотрудниками Института. Значительные успехи достигнуты в создании быстродействующей, надежной и защищенной ЛВС. Для решения важных вопросов по обеспечению защиты ЛВС развивались методы мониторингования сети, способные выполнять предварительную оценку состояния всей сетевой структуры. В 2005 г. работы по созданию гигабитной опорной сети удостоены первой премии ОИЯИ.

Гигабитная сетевая структура ОИЯИ (рис. 1) представляет собой совокупность технических и программных средств, составляющих фундамент сетевой информационно-вычислительной инфраструктуры ОИЯИ — основу, на которой эта инфраструктура строится и развивается. Гигабитная сетевая структура решает следующие задачи:

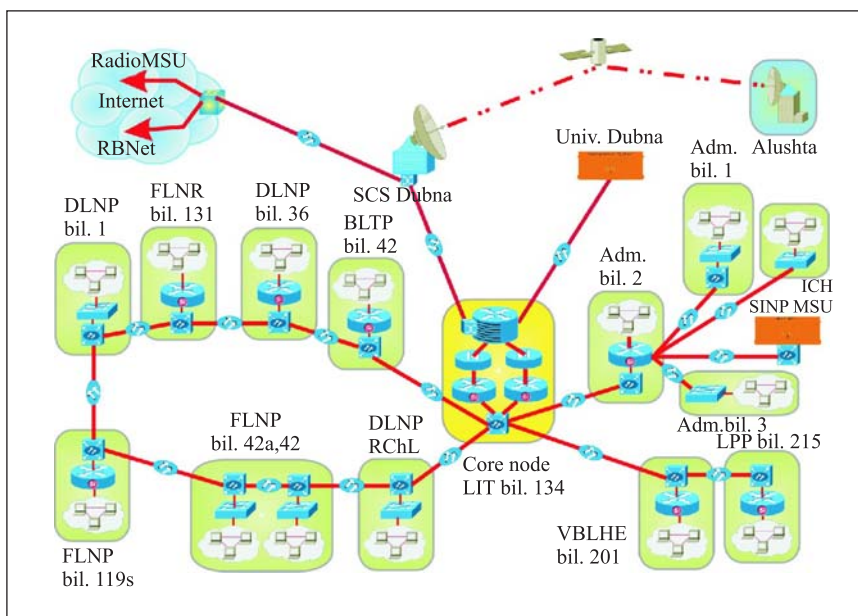


Рис. 1. Локальная сеть ОИЯИ и каналы связи

- объединение в единое информационное пространство всех компьютерных ресурсов ОИЯИ;
- организация и предоставление сетевого доступа к информационно-вычислительным ресурсам для различных групп пользователей;
- обеспечение удаленного доступа к информационным ресурсам российских и зарубежных научных центров для исследователей всех подразделений ОИЯИ;
- создание единого информационного пространства для всех сотрудников ОИЯИ с возможностью обмена данными между всеми подразделениями Института;
- обеспечение сервисов удаленного доступа к ресурсам ОИЯИ с домашних компьютеров сотрудников ОИЯИ.

Создание распределенной высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры и ресурсов хранения данных сосредоточено вокруг Центрального информационно-вычислительного комплекса (ЦИВК) ОИЯИ, который является ядром распределенной инфраструктуры.

Более 500 сотрудников ОИЯИ и других научных центров пользуются услугами ЦИВК ОИЯИ, который является частью российского грид-сегмента, используемого для задач ЛНС и других приложений. В настоящее время ЦИВК ОИЯИ включает в себя интерактивный кластер общего доступа, вычислительную ферму общего доступа для моделирования и обработки данных целого ряда физических экспериментов, вычислительную ферму для задач экспериментов на ЛНС, вычислительную ферму для выполнения параллельных вычислений на основе современных сетевых технологий (Myrinet, SCI и т. д.), вычислительную ферму LCG, включенную во всемирную вычислительную инфраструктуру.

Разработан подход к организации хранения больших массивов данных в ЦИВК. Приобретена и находится в стадии наладки оригинальная архитектура системы дисковых массивов CertonRAID 100 общей емкостью 39 Тбайт, которая была разработана в Университете Гейдельберга (Германия). Эта система обладает высокой производительностью, гибкостью, масштабируемостью, дополнительными средствами защиты информации. После ввода этой системы в эксплуатацию общее дисковое пространство для пользователей ЦИВК будет составлять около 50 Тбайт.

Введены в эксплуатацию 16 современных двух-процессорных вычислительных узлов (восемь из них заменили морально устаревшие узлы фермы общего назначения). Установлены новый сервер баз данных, работающий под управлением СУБД ORACLE 10G, сервер для грид-мониторинга, несколько серверов и рабочих станций для тестирования нового программного обеспечения. Выполнена модернизация нескольких вычислительных узлов для улучшения рабочих характеристик кластера. Завершается пере-

вод инфраструктуры ЦИВК на технологию 1 Гбит Ethernet.

ЦИВК включает более 120 процессоров суммарной производительностью около 100 kSI2K (1 kSI2K соответствует процессору Intel Xeon 2,8 ГГц), используемых как счетные узлы, и несколько серверов, предоставляющих общее дисковое пространство, базы для регистрации и авторизации, почтовые и другие сервисные услуги. Основная часть счетных ресурсов доступна пользователям через систему пакетной обработки, часть ресурсов подключена к глобальной инфраструктуре LCG с помощью средств грид. Подготовка и редактирование файлов, программ, заданий, документов, работа с сетевыми сервисами, приложениями, анализ и визуализация результатов и т. д. осуществляется пользователями во время сеансов работы на специализированных интерактивных машинах.

Осуществлен переход от операционной системы Linux (CERN Red Hat 7.3) к операционной системе Scientific Linux CERN Release 3.0.5 (SLC3) с соответствующим дополнительным программным обеспечением: компиляторы Gnu (C, C++, F77) и Intel (C, C++, F90), отладчики gdb и ddd, графические оболочки gnome и kde, ROOT, различные утилиты пользователей, различные библиотеки, включая CERN library.

Для доступа пользователей к глобальной инфраструктуре грид на одной из интерактивных машин ЦИВК ОИЯИ (lxxpub03.jinr.ru) реализован сервис User Interface. На LCG-инфраструктуре ОИЯИ установлены следующие сервисы: доступ к ресурсам хранения информации (SE — Storage Element) на основе системы DPM, грид-очередь пакетной обработки заданий (CE — Computing Element), сервис поиска ресурсов (RB — Resource Broker), информационный сервис (BDII); расширенный сервис для предоставления разрешения на работу в среде грид (MyProxy).

На ферме LCG из 20 вычислительных узлов установлено прикладное ПО для экспериментов на ЛНС: VO-alice-geant42ndProd_p01, VO-cms-CMKIN_4_4_0_dar, VO-cms-OSCAR_3_6_5_SLC3_dar, VO-cms-ORCA_8_7_1_SLC3_dar, VO-cms-ORCA_8_4_0, VO-lhcb-RTTC-v1, VO-lhcb-Gaudi-v15r5.

На смену прежней системе пакетной обработки PBS установлена его новая усовершенствованная версия, называемая Torque, и интеллектуальный диспетчер Maui.

Для улучшения характеристик работы сетевых сегментов ЦИВК протокол NFS был заменен на протокол AFS для доступа к ПО, а для доступа к данным внедряются интеллектуальные средства DPM (Disk Pool Manager) и dCache.

Пользователи, работающие в 17 физических экспериментах (ALICE, ATLAS, CMS, COMPASS, D0, DIRAC, H1, HARP, HERMES, KLOD, NA-48, NEMO, OPERA, STAR и др.), объединены в отдель-

Таблица 2

ЛИТ	ЛЯП	ЛФЧ	ЛЯП	ЛЯР	ЛТФ	Другие организации	ЛНФ	Управление ОИЯИ
171	104	53	44	34	14	28	12	9

Таблица 3

ЛТФ	ЛИТ	ЛЯП	ЛВЭ	ЛФЧ	ЛЯР	Сеансы массового моделирования	ЛНФ
25	23	17	15	7	5	5	3

ные подгруппы (всего более 130 пользователей). Каждой подгруппе выделено дополнительное дисковое пространство для проведения моделирования, хранения и обработки экспериментальных и модельных данных, установлено специализированное ПО. Распределение пользователей ЦИВК по подразделениям ОИЯИ приведено в табл. 2.

В табл. 3 представлено использование процессорного времени на вычислительных фермах ЦИВК по подразделениям ОИЯИ в процентах.

В конце 2005 г. была модернизирована система электропитания ЦИВК. Установлена современная система энергоснабжения «Symetra» на базе модульной технологии распределенной системы электропитания, способной обеспечить надежную защиту и реальное непрерывное электропитание ЦИВК.

Работы ЛИТ по развитию грид-сегмента ОИЯИ и его включению в европейские и мировые грид-структуры связаны с участием в проекте LCG (LHC Computing Grid), развитием инфраструктуры LCG/EGEE, созданием распределенного российского Tier2-кластера, тестированием промежуточного программного обеспечения (middleware) грид, участием в экспериментах на LHC.

В рамках участия ОИЯИ в проекте LCG выполнен ряд работ. На локальных фермах ОИЯИ LHC и LCG проведены сеансы массового моделирования в рамках DC (Data Challenge). Проведено тестирование передачи данных по протоколу GridFTP (Globus Toolkit 3). Установлен специализированный сервер для мониторинга российских LCG-сайтов (<http://gcomon.jinr.ru:8080>). В настоящее время мониторинг базируется на системе MonALISA с использованием специально созданного программного обеспечения для установки и контроля клиентов MonALISA на основе RMS (Remote Maintenance Shell). Параллельно ведется освоение и изучение возможностей использования других систем мониторинга (GridICE, MapCenter). Разработан инструментарий G2G (GoToGrid) для автоматической установки и настройки сайта LCG.

Группа сотрудников ЛИТ представляет ОИЯИ в консорциуме RDIG (Russian Data Intensive Grid — Российский грид для интенсивных операций с данными) — национальной федерации в международном инфраструктурном проекте EGEE (Enabling Grids for

E-science). Деятельность ОИЯИ в EGEE связана с обеспечением учета прохождения заданий и мониторингом ресурсов консорциума RDIG, развертыванием и тестированием ПО промежуточного уровня, участием в оценке компонентов ОМП и GT4, тестированием программного обеспечения gLite, координацией проведения сеансов Service Challenge в России.

Следует отметить развитие системы CASTOR2, разработку служебного модуля для выполнения функции сборщика мусора, развитие системы MCDDB (<http://mcdm.cern.ch>), разработку структуры и иерархии базы данных для эксперимента CMS.

И, наконец, последнее по очередности, но не по своей значимости — работы в рамках проекта «Дубна-грид». Проект нацелен на создание распределенной среды метакомпьютинга на основе свободных вычислительных ресурсов офисных компьютеров в университете «Дубна», средних школах и других высших учебных заведениях Дубны. Проект предусматривает создание общего пула вычислительных узлов более 1500 единиц. Он базируется на Соглашении между администрацией г. Дубны, Объединенным институтом ядерных исследований и университетом «Дубна» по созданию общегородской многоцелевой информационной инфраструктуры нового поколения, основанной на грид-технологиях и частично финансируемой из грантов, выделяемых городом Дубной и Российским фондом фундаментальных исследований.

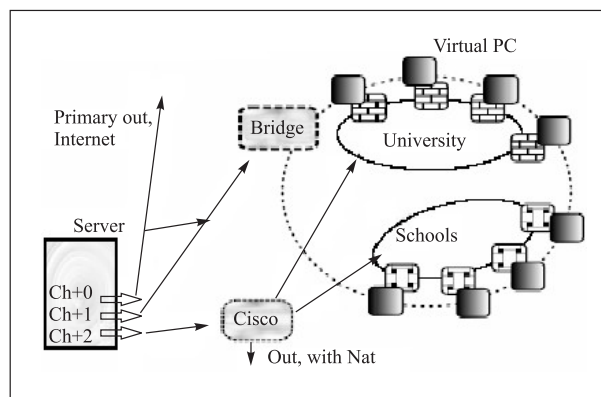


Рис. 2. Логическая схема метакластера «Дубна-грид»

В ЛИТ изучались различные подходы к созданию вычислительной инфраструктуры такого мас-

штаба на основе существующих технологий. Поскольку операционная система Windows Microsoft, которая используется повсеместно для офисных компьютеров, не поддерживает в распределенной среде сложные, требующие значительного ресурса вычислительные задачи, то для построения метакластера было решено использовать технологию, основанную на Linux. Для достижения поставленных целей необходимо объединить несколько технологий и все потенциальные вычислительные ресурсы в инфраструктуру метакластера «Дубна-грид», который будет управляться из единого центра, расположенного в ЛИТ ОИЯИ. Логическая структура метакластера приведена на рис. 2.

В ЛИТ создается грид-лаборатория «GridLab» для разработки на ее базе образовательной программы по грид-технологиям для ученых ОИЯИ и стран-участниц, студентов, аспирантов и преподавателей школ г. Дубны. С технической точки зрения

GridLab — это специализированная часть проекта «Дубна-грид», состоящая из семи рабочих узлов и одного сервера. В ближайших планах разработка лекций и наборов специальных практических работ в области грид-технологий.

Традиционная задача обеспечения информационной, алгоритмической и программной поддержки научной и производственной деятельности ОИЯИ включала широкий спектр работ как на уровне ЛИТ, так и на уровне ОИЯИ. Ведутся работы по систематическому развитию и обслуживанию баз данных и информационных систем с учетом запросов и потребностей пользователей. В результате этой работы достигнут значительный прогресс в сопровождении главных информационных серверов ОИЯИ и ЛИТ: www.jinr.ru и lit.jinr.ru. Специалисты ЛИТ проводили все необходимые работы для НТО АСУ ОИЯИ по программному обеспечению и централизованной поддержке административных баз данных.

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДЛЯ ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Дубненская группа отвечает за пропорциональные камеры ВРС физической установки Н1 в DESY. На экспериментальных данных 2004–2005 гг. была выполнена геометрическая калибровка ВРС по отношению к двум близстоящим детекторам: центральной струйной камере СЖС и калориметру SpaCal. Геометрическая калибровка ВРС была проведена также и для силиконового трекера BST, расположенного вблизи точки взаимодействия. В результате калибровки стандартные отклонения DR , Dx , dy трек-сегментов, реконструированных в ВРС, от экстраполированных траекторий частиц из соседних детекторов составили менее 0,1 см, в то время как ранее эти значения равнялись 1–2 см. Для ВРС была выполнена дополнительная фильтрация конкурирующих в радиусе 3 см треков путем выбора наилучшего трека с использованием критерия χ^2 . Созданные программы включены в официальную версию математического обеспечения эксперимента Н1 [1].

Модификации программ стандартного математического обеспечения для эксперимента CMS, состоящие в улучшении алгоритма построения трек-сегментов в катодно-стриповых камерах CSC и генератора начальных параметров траекторий мюонов, привели к существенному улучшению эффективности реконструкции и разрешения по поперечному импульсу P_T для жестких мюонов на модельных данных: для мюонов с $P_T = 1$ ТэВ эффективность составила не менее 96 %, а P_T -разрешение — менее 8 %. Особенно значительный результат был получен

для реконструкции ди-мюонов в процессах Дрелла–Яна, где эффективность удалось повысить на 12–20 % (рис. 3). Указанные модификации программ включены в официальную версию математического обеспечения CMS [2].

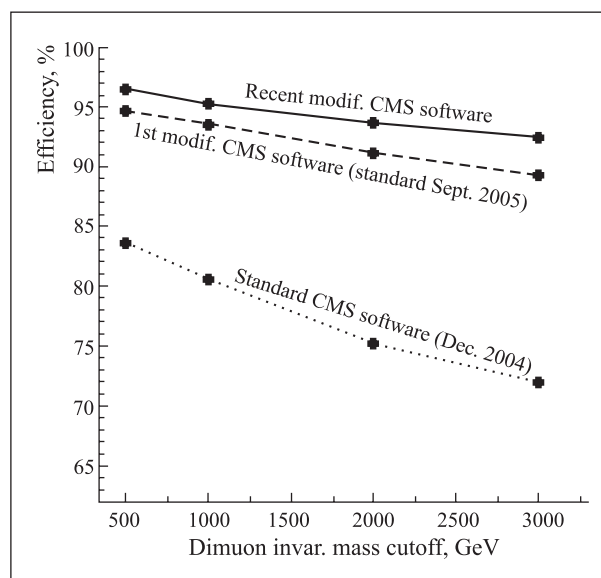


Рис. 3. Эффективность реконструкции ди-мюонов в процессах Дрелла–Яна для стандартного и модифицированного программного обеспечения CMS для обрезаний по массе 0,5; 1; 2 и 3 ТэВ

Группа ученых ЛИТ в коллаборации CBM внесла заметный вклад в разработку методов и алгоритмов

реконструкции событий в эксперименте СВМ. Проблема восстановления треков может быть разделена на поиск и фитирование трека. Специалистами из ЛИТ были применены различные конкурентные подходы как для нахождения трека, так и для восстановления его начальных параметров. Для нахождения

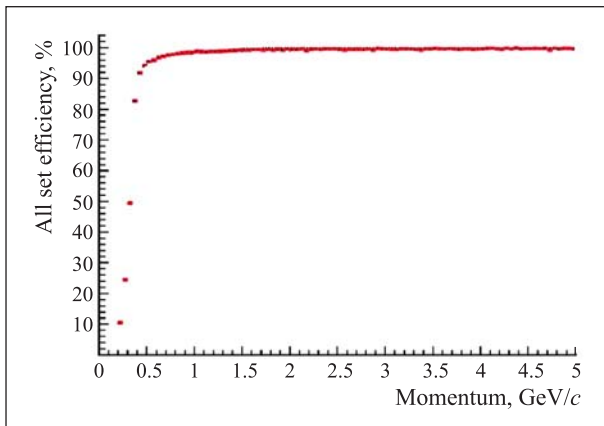


Рис. 4. Эффективность реконструкции трека как функция импульса

треков были применены метод прослеживания трека в трехмерном пространстве и метод клеточных автоматов. Для решения задачи реконструкции импульса использовался фильтр Кальмана, а также глобальные методы фитирования, основанные на аппроксимации

магии полиномами. Фильтр Кальмана использовался также для определения первичной и вторичной вершин. Эффективность реконструкции трека для частиц, обнаруженных, по крайней мере, в четырех станциях, показана на рис. 4. Треки частиц с большим импульсом восстанавливаются очень хорошо с эффективностью 99,45 %, в то время как многократное рассеяние в материале детектора приводит к понижению эффективности, составляющей 89,46 % для медленных частиц.

Эффективность реконструкции для быстрых первичных треков с импульсом более 1 ГэВ/с является почти стопроцентной, в то время как эффективность реконструкции всех быстрых треков немного ниже из-за присутствия вторичных треков, которые порождаются вдали от области мишени. Полная эффективность для всех треков с большой долей мягких вторичных треков составляет 96,98 % [3].

Разработана эластичная нейронная сеть (Elastic Net) для автономного обнаружения колец в RICH-детекторе. Метод не требует никакой предварительной информации о треке и может использоваться в триггере. Применение данного метода на детекторе RICH эксперимента СВМ обеспечивает эффективность 94,3 % и высокую скорость (5,4 мс на событие с приблизительно 1400 срабатываниями в RICH-детекторе). Ввиду простоты вычислений и высокой скорости предусматривается реализация этого алгоритма аппаратными средствами, что может увеличить скорость на несколько порядков [4].

МЕТОДЫ И ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ МАГНИТНЫХ СИСТЕМ

При решении трехмерных нелинейных задач магнитостатики методом конечных элементов получают обобщенные приближенные решения. В общей

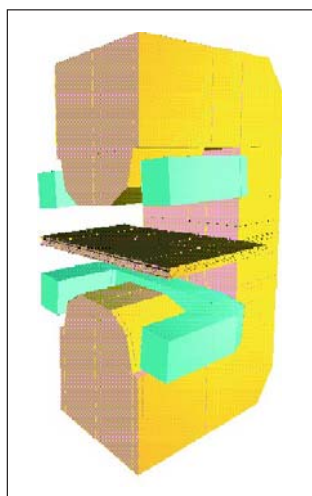


Рис. 5. Расчет дипольного магнита для эксперимента PANDA (1/2 симметричная часть)

теории метода определение погрешности вычислений основано на проверке аппроксимации точного решения задачи, которое, как правило, неизвестно.

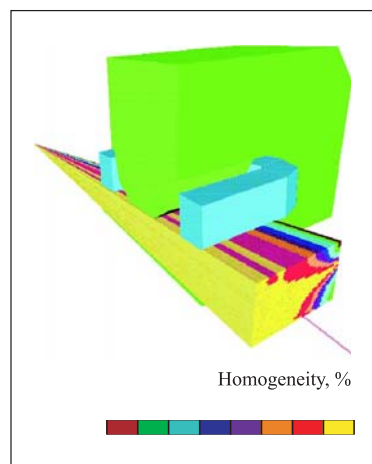


Рис. 6. Распределение однородности поворотной силы магнита (1/4 симметричная часть)

Представлены формулы, связывающие погрешность конечно-элементных задач с легко вычисляемыми локальными характеристиками. Приведен пример

использования характеристик при расчете модели дипольного магнита эксперимента PANDA (рис. 5, 6) [5].

МЕТОДЫ И ПРОГРАММЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И АНАЛИЗА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Продолжается разработка методов математического описания нелинейных самоорганизующихся структурных изменений в UO_2 в процессе его выгорания в реакторах атомных электростанций на основе клеточных автоматов (КА). Это позволило очень эффективно, методами КА извлекать всевозможные количественные характеристики структур, изображенных на микрофотографиях, для последующего их использования в теоретических моделях процесса. Кроме того, и это еще более важно, такой подход позволил сформулировать математические модели процесса непосредственно в терминах самих элементов изображения. В частности, микрофотографии, отвечающие меньшему выгоранию, могут быть приняты в качестве начальных данных для программы расчета (с помощью некоторых локальных правил взаимодействия, заданных на простейших элементах изображения — пикселях) визуального изображения состояния топлива при больших сроках эксплуатации. Для того чтобы проверить соответствие между теоретической моделью и экспериментом, изображение, полученное с помощью КА-алгоритма, сравнивалось с реальным изображением, отвечающим определенной степени выгорания топлива. Были использованы некоторые строгие математические результаты теории клеточных автоматов (относящихся к моделям Изинга, голосования и др.) для интерпретации ряда особенностей поведения топлива, обнаруженных экспериментально. Впервые для описания степени выгорания применялись различные методы расчета фрактальной размерности пространственных структур, образующихся в UO_2 в процессе работы ядерного реактора. Фрактальная размерность оказалась естественной и важной характеристикой, описывающей степень разрушения материала, и, следовательно, она может отражать уровень аварийной опасности использования топлива на данной стадии выгорания [6].

В работе, выполненной сотрудниками ЛИТ и ЛВЭ, разработана модель температурного пика для описания трекообразования в $YBa_2Cu_3O_{7-x}$. Модель демонстрирует некоторые интересные особенности: явление «электронной закалки» и бифуркационную зависимость решения от параметров. Показано, что энергия, затраченная на формирование трека, должна быть равна теплоте плавления, а также

что модель «эпитаксиального восстановления» здесь не применима [7].

Анализ зависимости между переменными — это одна из главных задач технического и научного исследований. Основная проблема задач фильтрации, сжатия и прогноза данных состоит в поиске оптимальных или хороших решений. Предлагается новый подход к анализу сложных зависимостей с относительно малым шумом, основанный на четырехточечной методологии. Предложенный алгоритм LOCUSD разбивает интервал/кривую на подынтервалы/сегменты различной длины, находит локальные кубические оценки для каждого сегмента и реализует методику получения интегральных кубических аппроксимирующих функций. Нахождение узловых точек в режиме автоматического слежения и итерационные схемы вычислений составляют две главные особенности предложенного метода, использующего специальную модель аппроксимации. Предложен метод кусочно-кубической аппроксимации с автоматическим обнаружением узлов, в котором гладкость первых производных аппроксимант, рассчитанных по входным данным без ошибок, является приемлемой. Меньшее значение параметра δ дает на выходе большее число сегментов с более точными аппроксимирующими функциями. Для зашумленных данных желательно увеличивать шаг h и δ ; цель состоит в том, чтобы найти такое δ , которое даст желаемое качество аппроксимаций и приемлемое число сегментов [8].

Прогресс, достигнутый в последние годы в развитии экспериментальных методов электронной импульсной спектроскопии (ЭИС) (когда в конце реакции появляются как минимум два быстрых электрона, измеряемых на совпадении), в частности, развитие спектроскопии по импульсу иона отдачи в холодной мишени (cold-target recoil-ion momentum spectroscopy (COLTRIMS)) позволяет выполнить точные, кинематически полные исследования сложных атомных соударений. Процессы двойной ионизации атома гелия электронным ударом, однократной ионизации с одновременным возбуждением и двукратной ионизации изучались при большом значении переданного импульса с использованием энерго- и импульсно-дисперсионного бинарного ($e, 2e$) спектрометра. Эксперимент выполнялся при энергии воздействия 2080 эВ в симметричной некопланарной

геометрии. Таким образом, была достигнута большая передача импульса 9 а. е., то есть значение, которое никогда еще не было реализовано для изучения двукратной ионизации атома гелия. Измеренные сечения ($e, 2e$) и ($e, 3-1e$) для переходов в $n = 2$ возбужденное состояние He^+ и в дважды ионизированное состояние He^{2+} были представлены как нормализованные значения относительно значений сечений для переходов в основное состояние $n = 1 \text{He}^+$. Соответствующие численные результаты для нормированных сечений были получены в плосковолновом импульсном приближении (plane-wave impulse approximation (PWIA)) первого порядка с использованием различных волновых функций основного состояния атома гелия He (с целью исследования моделей динамики процессов и структуры квантовой корреляции двухэлектронных состояний). Показано, что форма зависимости экспериментальных сечений ($e, 2e$) и ($e, 3-1e$) от переданного импульса хорошо воспроизводится PWIA-вычислениями только тогда, когда используются сильно коррелированные волновые функции электронов атома гелия [9].

Проведено численное исследование и анализ структуры и свойств полидисперсной популяции ве-

зикул из димристоилфосфатидилхолина (ДМФХ) в трех фазах: гель, рипл и жидкость. Зависимость толщины мембраны ДМФХ от температуры была восстановлена из эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов на основании модели разделенных формфакторов и гидрофобно-гидрофильного приближения. Было показано, что толщина мембраны ДМФХ в жидкой фазе ($T = 30^\circ\text{C}$) находится в зависимости от искривления мембраны [10].

Проведено исследование свойств модели испарения влаги в пористом строительном материале прямоугольной формы. Разработаны и исследованы алгоритмы решения нелинейного уравнения диффузии с краевыми и начальными условиями, моделирующего динамику распределения концентрации влаги, и вычисления коэффициентов полинома, описывающего перенос влаги, с использованием экспериментальных измерений концентрации влаги в образце. Проведено изучение свойств модели в зависимости от степени полинома, набора его коэффициентов и количества используемых экспериментальных данных [11].

ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

В рамках расширенной модели Крейчнана была исследована адвекция пассивного скаляра несжимаемым гиротропным турбулентным потоком. Предполагается, что статистические флуктуации поля скорости имеют гауссовское распределение с нулевым средним и шумом с конечными временными корреляциями. Вычисления проведены в двухпетлевом приближении в рамках теоретико-полевой ренормализационной группы. Было показано, что нарушение пространственной четности (гиротропия) стохастической среды не влияет на аномальный скейлинг, который является специфическим свойством такого рода моделей без гиротропии. Однако устойчивость асимптотических режимов, в которых имеет место аномальный скейлинг, а также эффективная диффузия сильно зависят от количества гиротропии [12].

Разрабатываются методы численного описания открытых квантовых систем с использованием детерминированных методов приближенного функционального интегрирования. Предложено выражение пропагатора для открытых систем в форме двойного функционального интеграла по условной мере Винера. Это позволяет применять полученные ранее формулы приближенного вычисления непосредственно к функциональным полиномам определенной степени для вычисления таких интегралов.

В рамках этого детерминированного подхода задача сводится к оценке обычных (римановских) интегралов низкой множественности. Эти формулы — фактически основа численного метода для изучения временной эволюции этих систем [13].

В сотрудничестве с Университетом Кейптауна в ЛИТ ОИЯИ ведется теоретическое и численное исследование частицеподобных возбуждений в нелинейных дисперсионных средах в различных моделях нелинейной оптики и теории конденсированных состояний, описываемых нелинейным уравнением Шредингера. Показано, что в отличие от случая «светлых» солитонов параметрическая накачка не приводит к неустойчивости доменных стенок (темных солитонов) ни при каких значениях амплитуды накачки и коэффициента диссипации в нелинейном уравнении Шредингера. Показано также, что параметрически возбуждаемые доменные стенки способны образовывать устойчивые связанные состояния. В отсутствие диссипации устойчивые доменные стенки двух типов и их устойчивые связанные состояния способны двигаться с ненулевой скоростью. Установленное сосуществование устойчивых доменных стенок двух типов существенно отличается от свойств соответствующих решений уравнения Гинзбурга–Ландау [14].

Изучена эволюция двумерных солитонов нелинейного уравнения Шредингера в модели нелинейного параметрического резонанса. Показано, что узловые солитоны на плоскости могут быть устойчивы к радиально-симметричным возмущениям в случае достаточно большого коэффициента диссипации. Однако, в отличие от безузловых солитонов, они всегда неустойчивы к азимутальным возмущениям. Численное моделирование показало, что, как правило, такие состояния эволюционируют в радиально-симметричное семейство устойчивых безузловых солитонов [15].

Изучение ускорения позднего времени Вселенной вместе с начальной сингулярностью и процессом изотропизации остается одной из наиболее привлекательных задач современной космологии. Проблема сингулярности рассмотрена в целом ряде работ в течение нескольких последних лет как для плоской симметричной Вселенной, так и вселенных типа Бианки. Были рассмотрены взаимодействующие спинорные и скалярные поля в плоском симметричном пространстве-времени, изучена возможность формирования солитоноподобных конфигураций. Выполнено исследование роли нелинейного спинорного поля в удалении пространственно-временной сингулярности для вселенных Бианки, когда имеет место самосогласованная система скалярного, спинорного, электромагнитного и гравитационного полей, заданная по модели Бианки I [16].

Стационарные решения уравнения Гросса-Питаевского определяют топологические когерентные моды, представляющие неосновное состояние бозе-эйнштейновского конденсата. Эти моды могут быть возбуждены с помощью переменных полей, частоты которых находятся в резонансе с переходными частотами между двумя энергетическими уровнями, соответствующими двум разным топологическим модам. Теория резонансной генерации этих мод была развита в следующих направлениях: описана многомодовая генерация; выведен критерий сохранения формы мод, накладывающий ограничения на допустимую пространственную зависимость резонансных

полей; исследованы эволюционные уравнения для случая трех когерентных мод; сделан полный анализ стабильности и предсказан эффект гармонической генерации и параметрической конверсии топологических когерентных мод. Показано, что динамический переход между режимами запертых и незапертых мод сопровождается существенными изменениями в эволюционном производстве запутывания [17].

В рамках совместных работ, проводимых ЛИТ, Институтом теоретической и экспериментальной биофизики (г. Пущино), Институтом биофизики клетки в области биоинформатики выполнены расчеты по исследованию транспортных РНК (тРНК). С помощью уравнения Пуассона-Больцмана рассчитано распределение электростатических потенциалов вокруг нескольких тРНК, создаваемых их фосфатным остовом, как для свободных тРНК, так и для связанных с белками, участвующими в трансляции: аминоксил-тРНК синтетазой и фактором элонгации EF-TU. Сравнение различных тРНК позволило идентифицировать области сильноотрицательного потенциала, связанные со структурными мотивами тРНК и инвариантные по отношению к тРНК. Эти области сохраняются при связывании тРНК с белками, но как электрические потенциалы в этих областях, так и их площади зависят от тРНК-связывающего белка. Сравнение рассчитанных сдвигов рК у флуоресцентно меченных тРНК с наблюдаемыми сдвигами рК показывает, что полный заряд тРНК составляет как минимум $-40q$, а скорее всего, близок к $-70q$. Большой заряд приводит к большим значениям электрического потенциала вокруг тРНК и позволяет предложить механизм переключения электрического заряда на соответствующей синтетазе. Из-за своего большого отрицательного заряда тРНК повышает концентрацию протонов в своем ближайшем окружении, наводя тем самым положительные заряды на гистиридиновых остатках синтетазы на ранней стадии тРНК-белкового узнавания. На основании этого исследования установлено, что электрическое поле тРНК является ключевым фактором распознавания тРНК [18].

МЕТОДЫ, АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ АЛГЕБРЫ

В рамках работ, проводимых в ЛИТ в области компьютерной алгебры, исследуются когомологии ограниченных алгебр Ли гамильтоновых векторных полей. Ограниченные, или p -алгебры Ли векторных полей — это конечномерные аналоги соответствующих классических алгебр, определенные над полями положительной характеристики p . Проведенные компьютерные вычисления с p -алгебрами Ли векторных полей, сохраняющих симплектическую структуру (т. е. алгебры Гамильтона и Пуассона), выявили важные и интересные особенности

устройства их когомологий. Доказаны утверждения, объясняющие эти особенности [19].

Предложена новая универсальная конструкция для построения моделей математической физики, названная *системой дискретных отношений на абстрактном симплицальном комплексе*. Эту конструкцию можно интерпретировать как естественное обобщение клеточного автомата и теоретико-множественный аналог системы полиномиальных уравнений. Разработаны и реализованы на языке Си алгоритмы для *анализа совместности* системы дис-

кретных отношений и построения канонических разложений дискретных отношений. Предложен регулярный способ введения топологии на произвольном дискретном отношении с помощью его канонического разложения. Это позволяет развивать стандартные средства алгебраической топологии (группа гомологий, кольцо когомологий и т.д.) для отношений. Применение разработанной техники к клеточным автоматам — частному случаю систем дискретных отношений — позволило получить ряд новых результатов. Наиболее интересным из них является обнаружение того, что наличие нетривиальных собственных следствий может определять глобальное поведение автомата. Если число состояний q — степень простого числа, т.е. $q = p^n$, дискретные отношения можно выразить через полиномы над полем Галуа \mathbf{F}_q и для анализа совместности использовать стандартный метод базисов Гребнера. Время вычисления базиса Гребнера клеточного автомата «Life» с помощью системы Maple 9 составляет 1 ч 22 мин. Предложенный метод позволяет получить аналогичный результат примерно в 5000 раз быстрее, т.е. за время меньше 1 с [20].

С помощью средств компьютерной алгебры рассмотрены асимптотические разложения ядра оператора теплопроводности для эллиптических дифференциальных операторов, действующих на компактных замкнутых искривленных многообразиях. Коэффициенты этого разложения являются величинами фундаментальной важности в квантовой теории поля, квантовой гравитации, спектральной геометрии и топологии многообразий. Получение явных выражений для этих величин — чрезвычайно трудоемкая задача. Особенно это касается современной физики, изучающей сложные операторы (высокого порядка и неминимальные) на сложном геометрическом фоне (в присутствии кручения и калибровочных полей в дополнение к риманову тензору кривизны). Фактически вычисления не могут быть выполнены без использования средств компьютерной алгебры. Описаны ковариантный алгоритм вычисления коэффициентов ядра теплопроводности и его реализация в виде двух программ CoincidenceLimits и DWSGCo-efficient, написанных на языке Си. Приведены некоторые результаты, впервые полученные с помощью этих программ. Наиболее существенные результаты относятся к неминимальным операторам и многообразиям с кручением [21].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Aktas A. et al. DESY 05-16. 2005; hep-ex/0510016; Eur. Phys. J. (submitted).
2. Голутвин И.А. и др. Препринт ОИЯИ P2-2005-7. Дубна, 2005; Nucl. Phys. (submitted).

3. Kisel I. // Nucl. Instr. Meth. A (submitted); Gorbunov S., Kisel I. // Nucl. Instr. Meth. A (submitted).
4. Gorbunov S., Kisel I. // Nucl. Instr. Meth. A (submitted).
5. Ritman J., Yuldashev O.I., Yuldasheva M.B. JINR Preprint E11-2005-49. Dubna, 2005; Zhidkov E.P., Yuldashev O.I., Yuldasheva M.B. // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series «Appl. and Comp. Math.». 2005. V. 4, No. 1. P. 93–101.
6. Akishina E.P., Ivanov V.V., Kostenko B.F. // Part. Nucl. 2005. V. 2, No. 1(124). P. 59–72.
7. Kostenko B.F., Pribis J., Goncharov I.N. JINR Preprint E17-2005-61. Dubna, 2005; Part. Nucl., Lett. (submitted).
8. Dikoussar N.D., Torok Cs. // Proc. of the Conf. «PRASTAN 2005», Banska Bystrica, June 11–17, 2005. Bratislava, 2005. P. 160–165.
9. Watanabe N. et al. // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 032705-1-11; Vinitzky P.S., Popov Yu.V., Chuluunbaatar O. // Ibid. P. 012706-1-9.
10. Kiselev M.A. et al. JINR Preprint E14-2005-93. Dubna, 2005; physics/0507140; Eur. Biophys. J. (submitted).
11. Amirkhanov I.V. et al. // Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series «Appl. and Comp. Math.». 2005. V. 4, No. 1. P. 82–92.
12. Chkhetiani O.G. et al. JINR Commun. E17-2005-135. Dubna, 2005; Chkhetiani O.G. et al. // Proc. of RG2005, Helsinki, Finland, Aug. 30 – Sept. 3, 2005.
13. Rushai V.D., Lobanov Yu.Yu. // Phys. Rev. E. 2005. V. 71. P. 066708.
14. Zemlyanaya E.V., Barashenkov I.V., Woodford S.R. // Lecture Notes in Comp. Sci. 2005. V. 3401. P. 590.
15. Alexeeva N.V., Zemlyanaya E.V. // Ibid. P. 91.
16. Saha B., Shikin G.N. // Intern. J. Theor. Phys. 2005 (in press); Saha B., Shikin G.N. // Bulgar. J. Phys. (in press); Saha B., Shikin G.N. // Vestnik PFU. gr-qc/0104089; Saha B., Boyadjiev T. // Gravity, Astrophysics and Strings @ the Black Sea / Eds. P. P. Fiziev, M. D. Todorov. Sofia, 2005. P. 226–233; gr-qc/0308061; Saha B. // J. Astrophys. Space Sci. 2005. V. 299(1). P. 149–158; gr-qc/0309062.
17. Yukalov V.I. et al. // Am. Inst. Phys. Conf. Proc. 2005. V. 770. P. 218–227; Yukalov V.I., Yukalova E.P. // J. Low Temp. Phys. 2005. V. 138. P. 657–662.
18. Polozov R.V. et al. // Biochemistry. 2005 (in press); Polozov R.V. et al. // Part. Nucl., Lett. 2005. V. 2, No. 4(127). P. 82–90.
19. Korniyak V.V. // Programming and Comp. Software. 2005. V. 31, No. 2. P. 87–90.
20. Korniyak V.V. // Lecture Notes in Comp. Sci. 2005. V. 3718. P. 272–284; <http://arXiv.org/abs/math-ph/0504048>
21. Korniyak V.V. Focus on Numerical Analysis / Ed. J. P. Liu. N. Y., 2005. P. 1–25.