

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Главная задача Лаборатории информационных технологий (ЛИТ) состоит в обеспечении современными телекоммуникационными, сетевыми, вычислительными и информационными ресурсами, а также математической поддержкой теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ, институтами стран-участниц и другими научными центрами.

В 2006 г. деятельность лаборатории определялась двумя темами первого приоритета: «Информационное, компьютерное и сетевое обеспечение деятельности ОИЯИ» (тема 05-6-1048-2003/2007, руководители В. В. Иванов, В. В. Кореньков и П. В. Зрелов) и «Математическая поддержка теоретических и экспериментальных исследований, проводимых ОИЯИ» (тема 05-6-1060-2005/2007, руководители В. В. Иванов, Г. Адам и П. В. Зрелов) направления

«Сети, компьютеринг, вычислительная физика». Сотрудники лаборатории участвовали в исследованиях по 15 темам на уровне проектов и в 21 теме в рамках сотрудничества. Результаты исследований, выполненных по указанным темам, были опубликованы в реферируемых журналах, трудах научных конференций и препринтах.

Ряд научных проектов, представленных сотрудниками ЛИТ, получили гранты INTAS и Европейской комиссии в рамках сотрудничества России и ЕС, а также 10 грантов Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ). Пять проектов РФФИ связаны с созданием и развитием информационной, вычислительной и телекоммуникационной инфраструктуры ОИЯИ, а другие пять представляют собой инициативные научные проекты.

СЕТЕВАЯ, КОМПЬЮТЕРНАЯ И ИНФОРМАЦИОННАЯ ПОДДЕРЖКА ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОИЯИ

Сетевая структура ОИЯИ — это распределенный программно-аппаратный комплекс, использующий специализированное программное обеспечение и многофункциональное оборудование. Она служит основой распределенной информационно-вычислительной структуры ОИЯИ, целями которой являются: объединение используемых информационно-вычислительных ресурсов Института в единую структуру; создание единой информационно-вычислительной среды для всех пользователей ОИЯИ с использованием грид-технологий и обеспечение возможности обмена данными как между научными лабораториями, так и между административными подразделениями; предоставление удаленного доступа в российские и зарубежные научные сети; обеспечение удаленного доступа к ресурсам Института. Для выполнения этих задач сетевая инфраструктура должна обладать такими свойствами, как защи-

щенность, надежность, скорость передачи, простота обслуживания и масштабируемость.

Основные направления деятельности ЛИТ в области сетевой, компьютерной, информационной поддержки: обеспечение ОИЯИ и стран-участниц быстродействующими каналами связи; развитие и поддержка быстродействующей, надежной и защищенной локальной сети; создание и обслуживание распределенной высокопроизводительной вычислительной среды и средств массовой памяти; обеспечение информационной, алгоритмической и программной поддержкой научно-производственной деятельности ОИЯИ; развитие и сопровождение грид-сегмента ОИЯИ, его интеграция в европейскую и мировую грид-инфраструктуру.

Телекоммуникационные каналы связи ОИЯИ. Развитие внешних каналов компьютерной связи ОИЯИ включает: а) обеспечение надежного функ-

ционирования скоростного канала 1 Гбит/с ОИЯИ–Москва и планомерное увеличение его пропускной способности; б) участие ОИЯИ в работах по реализации национальной и международных исследовательских компьютерных сетей нового поколения (GLORIAD, GEANT2); в) интеграция с научно-образовательной сетью Дубны.

В настоящее время ОИЯИ арендует канал компьютерной связи с пропускной способностью 1 Гбит/с в канале 2,5 Гбит/с Федерального государственного унитарного предприятия «Космическая связь» (ГПКС). ОИЯИ имеет доступ к российским сетям и информационным ресурсам через российские сети RBNET + RUNNET (рис. 1).

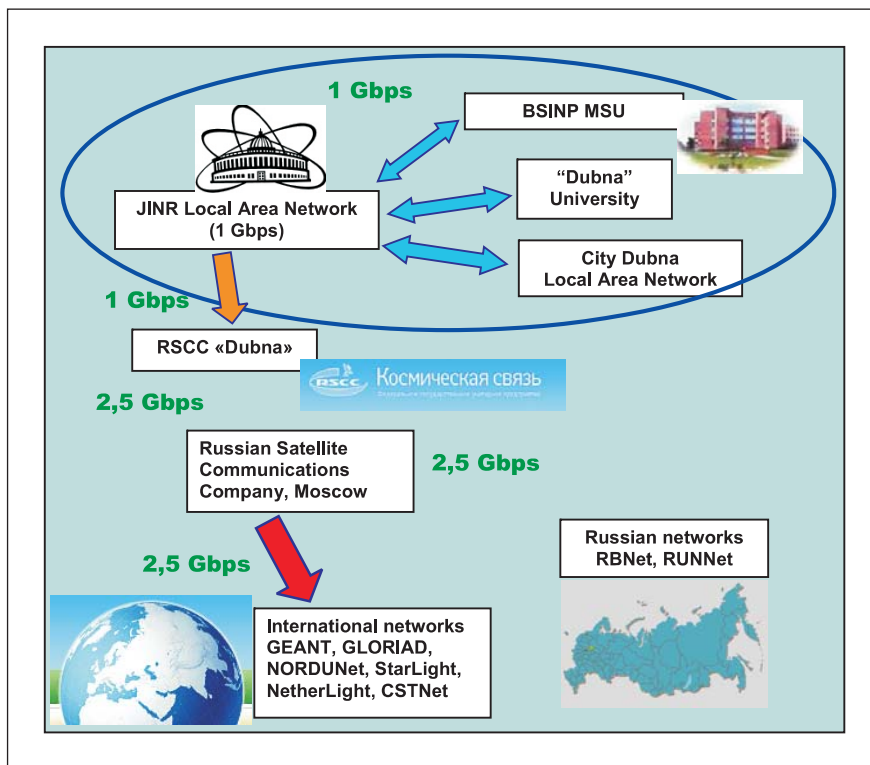


Рис. 1. Схема телекоммуникационных каналов ОИЯИ

Таблица 1

Лаборатории ОИЯИ	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт	Входящий трафик, %	Исходящий трафик, %
ЛИТ*	32,22	14,21	38,96	18,21
ЛЯП	14,03	18,49	16,96	23,71
ЛФЧ	7,87	10,55	9,52	13,53
ЛЯР	6,7	2,52	8,1	3,23
ЛВЭ	5,42	4,06	6,55	5,2
ЛНФ	5,16	20,5	6,24	26,28
ЛТФ	3,63	2,07	4,39	2,65
Университет «Дубна»	1,91	2,01	2,31	2,57
Администрация ОИЯИ	1,49	0,66	1,8	0,82
Серверы	1,38	2,39	1,67	3,06
Модемный пул	1,34	0,26	1,61	0,32

*Трафик ЛИТ включает общий грид-трафик ОИЯИ.

Дальнейшее развитие внешних коммуникаций предполагает следующие шаги: расширение канала Дубна–Москва до 10 Гбит/с в 2007 г., 40 Гбит/с в 2010 г. и 100 Гбит/с в 2015 г.; участие ОИЯИ в программе создания исследовательской сети нового поколения; разработка международного сегмента в рамках проектов GEANT2 и GLORIAD, увеличение

пропускной способности международных каналов до 10 Гбит/с в 2007 г., 40 Гбит/с в 2010 г. и 100 Гбит/с в 2015 г.; интеграция с муниципальной образовательной сетью и ее развитие (10 Гбит/с).

В табл. 1 приведено распределение трафика для тех подразделений Института, у которых входящий трафик превысил 1 Тбайт.

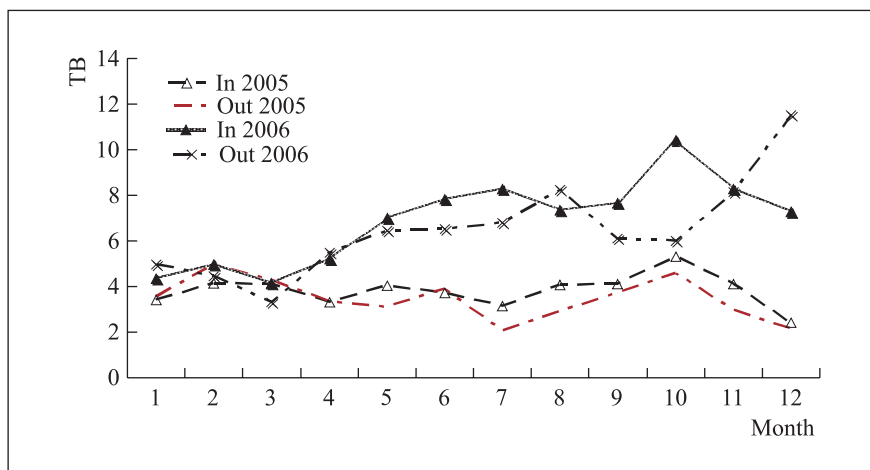


Рис. 2. Входящий и исходящий трафики ОИЯИ за 2005–2006 гг.

На рис. 2 приведено распределение входящего и исходящего трафиков ОИЯИ за 2005 и 2006 г. Суммарный годовой входящий трафик в 2006 г. составил 82,71 Тбайт (45,86 Тбайт в 2005 г.), а исходящий — 78,01 Тбайт (41,53 Тбайт в 2005 г.).

Локальная сеть ОИЯИ. Сетевая служба ЛИТ проводила систематическую работу по управлению локальной вычислительной сетью (ЛВС). В настоящее время ЛВС ОИЯИ включает в себя 5681 компьютер и узел (5335 в 2005 г.). В 2006 г. в ЛВС

было зарегистрировано 3173 пользователя, 863 пользователя модемного пула и 339 пользователей сервиса VPN.

Введен в эксплуатацию комплекс программного обеспечения, предназначенный для обнаружения в локальной сети и последующего блокирования компьютеров, зараженных Интернет-червями. В результате мероприятий, проведенных сетевой службой, интенсивность появления в сети компьютеров, зараженных подобными вирусами, снижена с первоначальных 15–20 случаев в неделю до 3–5 случаев в месяц.

Для обеспечения круглосуточной работы ЛВС ОИЯИ необходимо осуществлять постоянный контроль сети и обеспечивать ее защиту. С расширением сетевых сервисов, обеспечивающих удаленный доступ к ресурсам ОИЯИ с домашних ПК, доступ в Интернет из гостиниц Дубны, безопасность ЛВС приобретает особую степень важности.

В 2006 г. была проведена модернизация центрального узла связи (рис. 3) с целью построения отказоустойчивого ядра коммуникационной структуры ЛВС, достижения соответствующего уровня безопасности сети, получения хороших параметров передачи данных и инструментария для контроля поддержки, доступа и надежности сети. Запущено в эксплуатацию новое мощное коммутационно-маршрутизирующее оборудование Internet Cisco 7606 (процессор Supervisor Engine 720, MSFC3, PFC3B с памятью 1 Гбайт, 48-port 10/100/1000, система безопасности Firewall), центральный коммутатор Cisco Catalyst 6509E и маршрутизатор VPN Cisco 7513.

Центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ. Развитие распределенной высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры ОИЯИ и ресурсов хранения данных со-

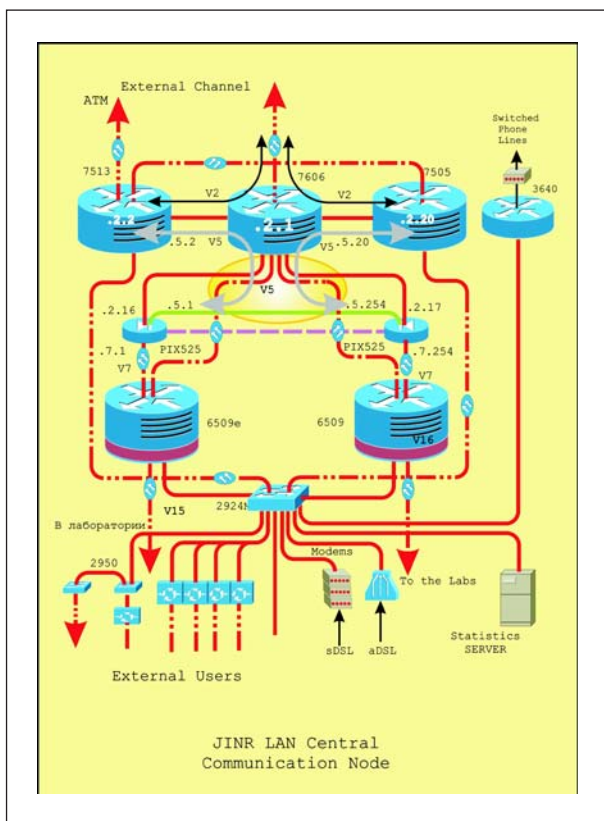


Рис. 3. Центральный узел связи ЛВС ОИЯИ

средоточено вокруг центрального информационно-вычислительного комплекса (ЦИВК) ОИЯИ, который является ядром данной инфраструктуры.

Более 500 сотрудников ОИЯИ и других научных центров пользуются услугами ЦИВК. В настоящее время ЦИВК ОИЯИ включает в себя интерактивный кластер, вычислительную ферму для моделирования и обработки данных целого ряда физических экспериментов с возможностью выполнения параллельных вычислений на основе современных сетевых технологий (Myrinet, SCI и т.д.), вычислительную ферму LCG (LHC Computing Grid) для задач экспериментов на LHC, включенную в вычислительную инфраструктуру LCG/EGEE (Enabling Grids for E-science).

В настоящее время в составе ЦИВК ОИЯИ 160 процессоров, системы дисковых массивов объемом 56 Тбайт (17 Тбайт RAID-5 и 39 Тбайт Serion100). Суммарная производительность комплекса составляет около 100 kSI2K. Ресурсы ЦИВК используются участниками экспериментов E391A (КЕК), COMPASS, D0, DIRAC, HARP, CMS, ALICE, ATLAS, HERAb, H1, NEMO, OPERA, HERMES, CBM, PANDA и др. для моделирования и анализа экспериментальных данных.

Количество пользователей ЦИВК по подразделениям ОИЯИ представлено в табл. 2.

В табл. 3 приведено использование процессорного времени ЦИВК по подразделениям ОИЯИ.

Таблица 2

ЛИТ	ЛЯП	ЛФЧ	ЛВЭ	Пользователи грид (не ОИЯИ)	ЛЯР	ЛТФ	ЛНФ	Администрация
182	120	60	48	33	28	15	12	9

Таблица 3

ЛЯП	ЛВЭ	ЛИТ	ЛТФ	ЛЯР	ЛФЧ	Не сотрудники ОИЯИ
40,84 %	37,06 %	12,02 %	7,57 %	1,77 %	0,6 %	0,14 %

Дальнейшее развитие ЦИВК как ядра распределенной грид-инфраструктуры предусматривает развитие инфраструктуры ЦИВК, отвечающей запросам и потребностям международных коллабораций, пользователей ОИЯИ и стран-участниц; развитие грид-сегмента ОИЯИ с набором необходимых сервисов; участие в международных, национальных и региональных проектах по развитию грид-технологий (LCG, EGEE, OSG, NorduGrid, Дубна-грид и т.п.); участие в разработке технологий гридификации приложений, позволяющих адаптировать пакеты прикладных программ к грид-среде.

Грид-технологии и проект LCG. В рамках участия ОИЯИ в проектах LCG/EGEE в 2006 г. выполнены работы по созданию вычислительных сервисов и внедрению технологии грид в обработку данных. В их числе поддержка и развитие сегмента LCG ОИЯИ в рамках инфраструктуры LCG (инсталлированы gLite 3.02, программное обеспечение для экспериментов на LHC); тестирование/оценка промежуточного программного обеспечения LCG (gLite); мониторинг грид-инфраструктуры LCG в ОИЯИ и других сайтов российского кластера Tier2; оценка новых технологий грид в свете их использования в LCG (Globus Toolkit 4); модернизация веб-портала LCG/EGEE в ОИЯИ; участие в разработке MCDB (MonteCarlo DataBase); развитие сервера генераторов физических процессов HERWEB и его интеграция в среду Дубна-грид; участие в работе по проекту ARDA (тестирование использования AtCom/LEXOR

для ATLAS; тестирование функциональности и производительности gLite-AMGA-сервиса в режиме репликации данных); участие в Data и Service Challenges для экспериментов CMS, ATLAS и ALICE; организация учебных курсов для администраторов LCG и пользователей ALICE из институтов Украины; организация обучения по LCG для пользователей ATLAS; организация курсов по изучению gLite в рамках второй международной конференции «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании». В настоящее время LCG-сегмент ОИЯИ обеспечивает поддержку сайт-сервисов (User Interface, Computing Element, Storage Element, Worker Nodes), базовых сервисов (Berkeley DB Information Index, Proxy Server, Resource Broker), специальных сервисов (2 VOboxes для ALICE и CMS; ROCMON, MON-box), PPS.

Разработан пакет GridCom (Grid Commander), включающий клиентскую часть (GridCom) в виде графической оболочки для работы пользователя с задачами и данными в LCG и программу-исполнитель запросов LEXOR.

В 2006 г. в рамках исследований по RDMS CMS выполнялась разработка информационно-аналитической системы для задачи «Калибровка передних калориметров с помощью радиоактивного источника». В результате создана база данных, выполнен ввод информации в полном объеме, реализована система просмотра информации с веб-доступом.

В 2006 г. выполнены обязательства ОИЯИ по участию в разработке on-line SW TDAQ ATLAS: компоненты on-line SW Resource Manager и Event Dump включены в состав релиза on-line SW TDAQ, подготовленного сотрудничеством TDAQ для запуска в 2007 г. на фазе Dress Rehearsal. В рамках работ по TDAQ ATLAS в ЛИТ создан испытательный полигон для инсталляции программного обеспечения Data Quality Monitoring Framework.

К концу 2006 г. в рамках проекта «Дубна-грид» создан испытательный полигон многоцелевой сети метакомпьютинга городского масштаба с общим количеством сконфигурированных узлов более 200. В ходе выполнения проекта разработаны технологии массовой инсталляции программного обеспечения на всех доступных узлах метакластера и система мониторинга. Метакластер интегрирован с системой пакетной обработки ОИЯИ. Реализована интеграция сервера HERWEB в среду Дубна-грид.

В ЛИТ создается грид-лаборатория «GridLab» для разработки на ее базе образовательной программы по грид-технологиям для сотрудников ОИЯИ и стран-участниц, а также для студентов, аспирантов и преподавателей школ Дубны. С технической точки зрения «GridLab» является специализированной частью проекта «Дубна-грид», состоящей из шести рабочих узлов и одного сервера.

Информационная и программная поддержка. Традиционная задача обеспечения информационной, алгоритмической и программной поддержки научно-производственной деятельности Института включает широкий спектр работ как на уровне лаборатории, так и ОИЯИ в целом. Проведена большая работа по систематическому развитию и обслуживанию баз данных и информационных систем с учетом запросов и потребностей пользователей. В результате был достигнут значительный прогресс в развитии веб-средств главных информационных серверов ОИЯИ и ЛИТ: www.jinr.ru и lit.jinr.ru. Сотрудники лаборатории проводили всю необходимую работу для НТО АСУ ОИЯИ по программному обеспечению и централизованной поддержке административных баз данных. В рамках поддержки единой информационной среды ОИЯИ на базе центрального сайта ОИЯИ и сайта ЛИТ осуществляется регулярная актуализация контента центральных серверов, их техническая поддержка и модернизация программной среды. Со-

здана и запущена новая версия сайта ЛИТ, посвященная 40-летию создания лаборатории.

Продолжается последовательное развитие библиотеки JINRLIB. Библиотека пополняется новыми программами, создаваемыми сотрудниками ОИЯИ. В 2006 г. добавлено шесть программных пакетов. Программы библиотеки переводятся на двойную точность, результаты работы проверяются на компьютерных платформах Unix и Windows. Традиционным является сопровождение библиотек программ, разрабатываемых другими научными центрами и организациями (CPCLIB, CERNLIB), оказание информационной и технической помощи пользователям. Полную информацию по библиотекам программ ОИЯИ можно найти на специализированном сервере <http://www.jinr.ru/programs/> и в информационных бюллетенях ЛИТ ОИЯИ.

Отдельного внимания заслуживает участие большой группы специалистов ЛИТ ОИЯИ в подготовке и проведении XXXIII Международной конференции по физике высоких энергий (ICHEP'06), проходившей в Москве с 26 июля по 8 августа 2006 г. в здании Российской академии наук. В рамках этой деятельности была создана специализированная информационная система «Конференция ICHEP'06», интегрированная с веб-сайтом конференции. Техническая поддержка конференции, осуществлявшаяся в сотрудничестве с ОАО «КОМСТАР-Объединенные Телесистемы», включала развертывание локальной компьютерной сети, организацию беспроводного доступа в Интернет, обеспечение оргкомитета и участников конференции телефонной связью (IP-телефония), интернет-трансляцию пленарных заседаний, а также организацию интернет-зала, оборудованного большим количеством стационарных компьютеров, свободными разъемом для ноутбуков участников и беспроводной связью.

Осуществлялась поддержка и развитие интерактивной информационной среды для оперативного доступа к научно-технической информации в Интернете (<http://dbserv.jinr.ru/~genis/Infpublish.htm>), позволяющая повысить эффективность работы научных сотрудников и инженеров с библио- и фактографическими данными. Работа выполняется совместно с сотрудниками Научно-технической библиотеки.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ И ТЕОРЕТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Основными задачами данного направления исследований в ЛИТ является обеспечение математической, алгоритмической и программной поддержки

экспериментальных и теоретических исследований, проводимых в ОИЯИ. В 2006 г. по результатам исследований опубликовано более 100 научных работ

в ведущих научных журналах и в материалах конференций. Более 40 докладов представлено на международных конференциях.

Математические методы в физике элементарных частиц и релятивистской ядерной физике. Решена проблема оптимизации распределения двумерного магнитного поля дипольного магнита с полем 4 Тл и диаметром апертуры 100–110 мм, предназначенного для быстроциклирующего синхротрона. Разработан математический метод, позволяющий минимизировать амплитуды высших гармоник магнитного поля с помощью варьирования местоположения токовых обмоток. Приведены результаты расчета двумерных магнитных полей сверхпроводящего магнита [1].

Продолжены работы в рамках участия в СВМ-коллаборации, целью которой является изучение состояния сильно сжатой ядерной материи на будущем ускорителе GSI. В 2006 г. проведено компьютерное моделирование различных вариантов сверхпроводящего дипольного магнита для эксперимента СВМ (рис. 4). На основе многомерной сплайн-аппроксимации построены дифференцируемые приближения магнитного поля в рабочей области магнита. Проводилось моделирование магнитных систем ускорительного комплекса GSI SIS100.

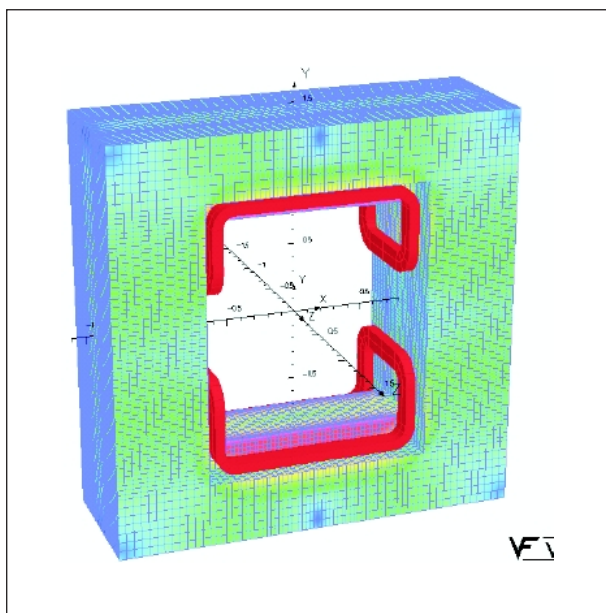


Рис. 4. Компьютерная модель одного из вариантов сверхпроводящего дипольного магнита для эксперимента СВМ

Ожидаемая в этих экспериментах большая множественность рождаемых частиц и неоднородное магнитное поле значительно усложняют реконструкцию событий. Группа ЛИТ ОИЯИ предложила несколько эффективных методов реконструкции событий и разработала соответствующие программы, которые уже включены в вычислительную среду эксперимента СВМ или проходят испытания и тестирование. В частности, разработаны два подхода по

реконструкции треков в STS-детекторе и алгоритмы распознавания треков в TRD-детекторе, предложены два подхода для нахождения черенковских колец в RICH-детекторе, разработаны методы определения импульсов частиц и т. д. [2].

Разработан метод внутреннего геометрического выравнивания внешней трекинговой системы эксперимента HERA-B. Создано программное обеспечение, которое протестировано на моделях Монте-Карло различного уровня сложности и реалистичности. Предложено обобщение метода на случаи нелинейной модели трека [3]. Метод был применен для анализа данных, измеренных в эксперименте HERA-B в 2002–2003 гг. [4].

Получено алгоритмическое решение актуальной для приложений и трудной в теоретическом плане задачи оптимальной сегментации кривой на заданном отрезке, в которой ищется оптимальное разбиение так, чтобы ошибка кусочно-полиномиальной аппроксимации на подынтервалах была бы минимальной. Для обнаружения узловых точек разработаны оригинальные метод и алгоритм автоматического слежения за кубическим сегментом кривой на основе критерия постоянства третьей производной кубической модели и рекуррентным вычислением оценки этой производной. Создан простой в вычислении, устойчивый к ошибкам и ориентированный на работу в режиме реального времени адаптивный алгоритм обнаружения узловых точек. На основе этого алгоритма разработаны MS Visual C# компоненты и Windows приложение APCA (Auto-tracking Piecewise Cubic Approximation). Эффективность алгоритма подтверждается результатами его работы при аппроксимации сложных кривых и реальных данных [5].

Проведено численное исследование скоростей образования изотопов полония в фольгах из висмута, вставленных в массивную свинцовую мишень, которая облучается пучком протонов с энергией 660 МэВ. Вычисления проводились двумя методами: в одном выход изотопов вычислялся при помощи программы MCNPX; в другом с помощью программы MCNPX вычислялся только спектр протонов в различных точках мишени, а затем вычисленный спектр сворачивался с экспериментальными данными по сечениям образования полония в реакции $Bi(p, xN + g)Po$ (рис. 5) [6].

С теоретико-полевой точки зрения пересмотрен механизм рождения кваркониев и показано, что в общем случае в низшем порядке механизм рождения тяжелых кваркониев допускает два типа разрезов. Первый соответствует обычному синглетному по цвету механизму. Второй механизм до сих пор не рассматривался и впервые исследован калибровочно-инвариантным способом. При этом введены новые четырехточечные вершины, напоминающие октетный по цвету механизм рождения кваркониев.

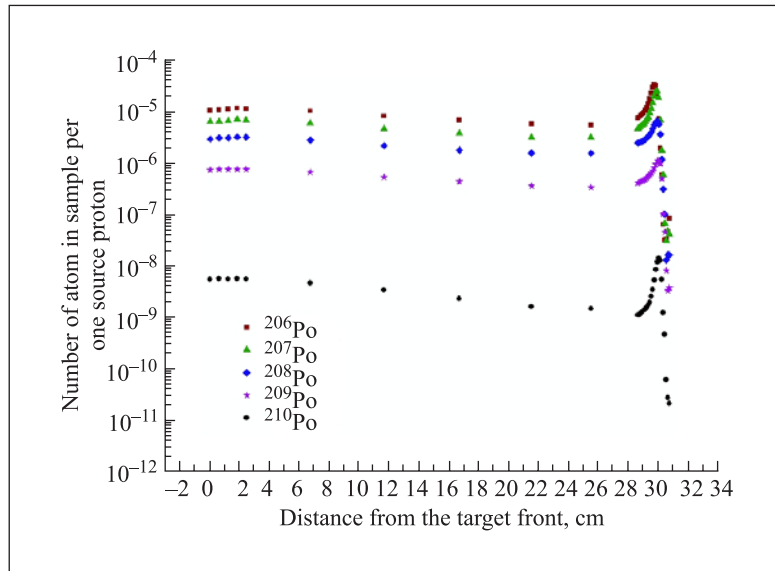


Рис. 5. Пространственное распределение скоростей образования полония в мишени

Эти новые объекты позволяют выйти за рамки статического приближения. Показано, что при большом поперечном импульсе J/ψ эти новые вклады могут быть даже больше вкладов от синглетного по цвету механизма. В случае ψ' теоретические неопределенности будут больше и возможно сравнение с имеющимися данными [7].

Развита теория образования лептонных пар в ядро-ядерных соударениях при высоких энергиях вне рамок борновского приближения [8]. Получено ватсоновское представление для амплитуды процесса $Z_1 + Z_2 \rightarrow Z_1 + Z_2 + e^+e^-$ и развита процедура ресуммирования ряда Ватсона на основе гипотезы инфракрасной стабильности амплитуды этого процесса. Найдено явное выражение для первых двух членов разложения амплитуды $Z_1 + Z_2 \rightarrow Z_1 + Z_2 + e^+e^-$ по инфракрасно-стабильным комплексам вплоть до слагаемых порядка $(Z_1 Z_2 \alpha^2)^4$. Результаты имеют важное значение для анализа экспериментов на RHIC и LHC.

Продолжена работа по совершенствованию теоретического обеспечения экспериментов DIRAC и NA-48/2 (ЦЕРН). Получены замкнутые выражения для формфакторов перехода между связанными состояниями димезоатомов и состояниями непрерывного спектра мезонных пар, характеризуемыми определенными значениями величины и направления относительного импульса [9]. Полученные результаты важны для расчета спектров продуктов ионизации димезоатомов, измеряемых в эксперименте DIRAC.

В рамках квантово-механического подхода проанализирован «касп»-эффект, обнаруженный в эксперименте NA-48/2 [10]. Дано дальнейшее обобщение амплитуды Н. Кабиббо с учетом электромагнитных эффектов T_c . Результаты теоретических расчетов (рис. 6, пунктирная линия) сопоставлены с экспериментальными данными (рис. 6, сплошная линия).

Получено удовлетворительное согласие между ними.

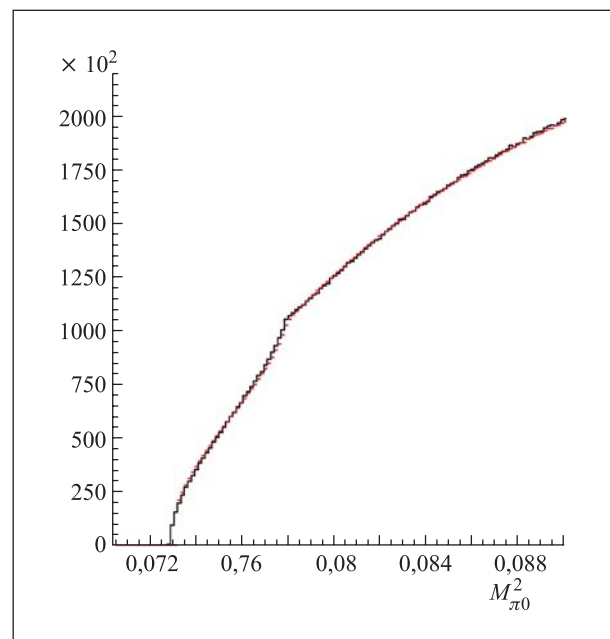


Рис. 6. Зависимость вероятности распада $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^0$ от квадрата инвариантной массы нейтральных пионов $M^2 = (p_1 + p_2)^2$

Полученные результаты позволяют по-новому описать пороговые аномалии, обнаруженные в эксперименте NA-48/2.

Для исследования проблемы начальной сингулярности и асимптотической изотропии, а также ранней инфляции и современного ускоренного расширения Вселенной была изучена система взаимодействующих нелинейного спинорного и скалярного полей в рамках космологической модели Бианки типа I

(VI) при наличии идеальной жидкости и космологической постоянной (Λ -член). Получены решения соответствующих полевых уравнений. Предложены некоторые модифицированные модели темной энергии, которые позволяют вызвать колебательную моду расширения. Также была изучена система, изменяющая со временем гравитационную (G) и космологическую (Λ) константы, а также система с магнитной жидкостью [11].

В рамках структуры пространственно-временной модели был исследован тензор Бела–Робинсона и его воздействие на развитие Вселенной [12]. Исследована природа космологических решений однородной анизотропной Вселенной, представленной моделью VI при наличии космологической постоянной Λ с учетом процесса диссипации, вызванного вязкостью. Рассматриваемая система полностью изучена в аналитическом и численном виде. Показано, что вязкость и член Λ демонстрируют существенное влияние на природу этих решений [13].

Создан комплекс программ для вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектра многомерных квантовых систем методом Канторовича [14–16]. Полученные при использовании этого метода задачи на собственные значения для систем обыкновенных дифференциальных уравнений решаются с помощью метода конечных элементов. Алгоритм, построенный в работе [14], применен к точно решаемой модели трех одномерных частиц на пря-

мой. Метод использовался для вычисления волновых функций дискретного и непрерывного спектра атома водорода в магнитном поле [15], которые необходимы для расчета скорости вынужденной рекомбинации под действием лазерных импульсов и, в конечном счете, для определения условий, при которых выход рекомбинировавших атомов будет наибольшим. Вычислены сечения фотоионизации водорода в основном состоянии.

Метод Канторовича использован также для решения нестационарного уравнения Шредингера [16]. С помощью унитарного разложения Паде оператора эволюции получены численные схемы с точностью до шестого порядка относительно шага по времени. Вычислены матричные элементы и потенциальные кривые атома водорода (рис. 7).

Построены специальные вариационные волновые функции основного состояния атома гелия для вычисления теоретических оценок сечения однократной и двукратной ионизации для описания современных $(e, 2e)$ - и $(e, 3-1e)$ -экспериментов [17]. Построены волновые функции атома гелия для основного состояния на экспоненциальном базисе, которые удовлетворяют условию Като (как в слабом, так и в сильном смысле).

Математические методы в ядерной физике и физике конденсированных сред. В рамках высокоэнергетического приближения и метода двойного

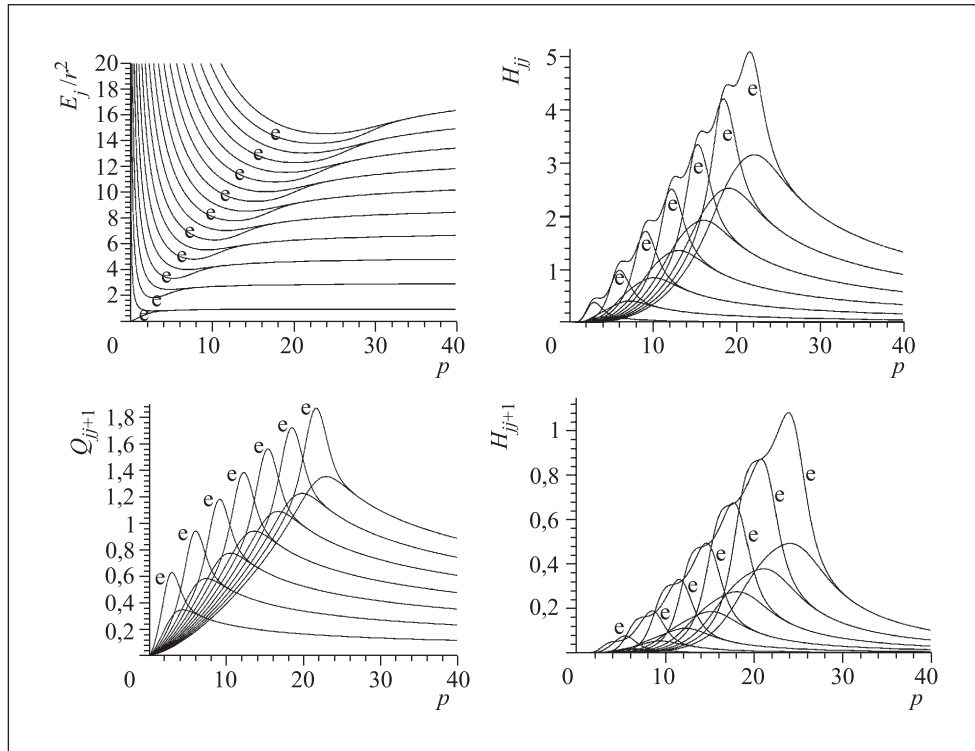


Рис. 7. Вычисленные матричные элементы $H_{ij}(r)$, $Q_{ij}(r)$ и потенциальные кривые $E_j(r)/r^2$ в зависимости от параметра $p = \gamma r^2/2$ для четного (отмечен символом «e») и нечетного состояний атома водорода для $|m| = 0$ и $\gamma = 1$

фолдинга разработана модель упругих ядро-ядерных взаимодействий [18], а также и неупругих взаимодействий с учетом коллективных возбуждений нуклонов [19]. Проведены методические расчеты с феноменологическим потенциалом Вудса–Саксона, подтверждающие применимость данного подхода для моделирования неупругих ядро-ядерных взаимодей-

ствий при энергиях от 10 до 100 МэВ на нуклон налетающего ядра. Сделано обобщение модели на случай микроскопического переходного потенциала двойного фолдинга. Проведено сравнение рассчитанных в микроскопическом подходе дифференциальных сечений упругого и неупругого рассеяния с экспериментальными данными (рис. 8).

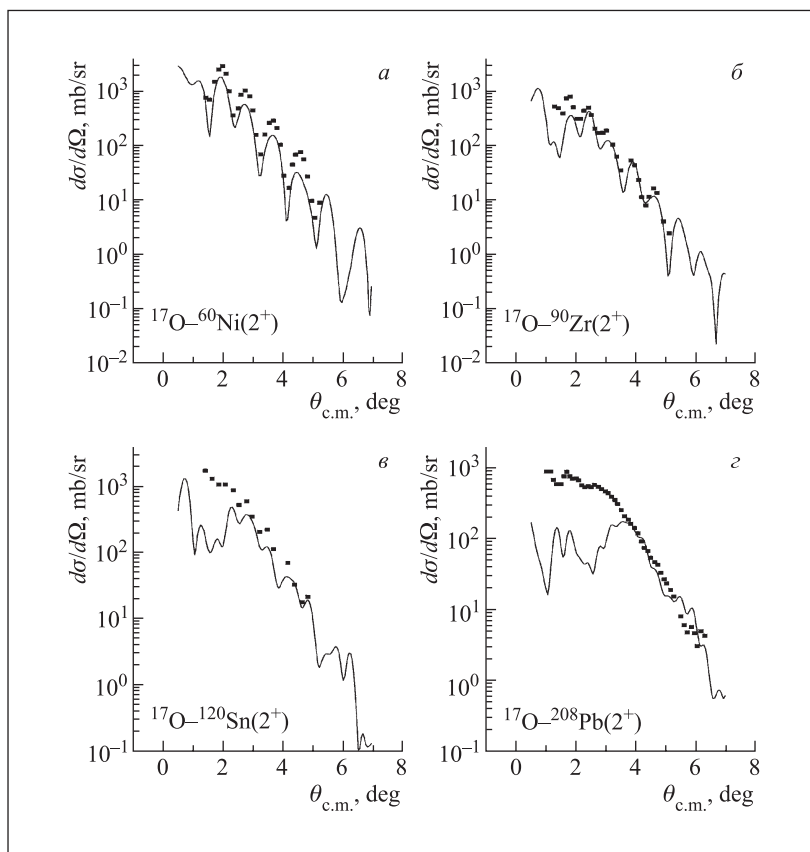


Рис. 8. Сравнение рассчитанных в микроскопическом подходе дифференциальных сечений неупругого рассеяния с экспериментальными данными

На основе микроскопической модели, объединяющей метод двойного фолдинга для вычисления вещественной части ядро-ядерного потенциала и высокоэнергетическое приближение для расчета мнимой части, проанализированы экспериментальные данные по полным сечениям реакций нейтроноизбыточных изотопов гелия и лития с кремнием. На основе перенормированных микроскопических потенциалов и их производных, добавленных для учета коллективных эффектов, построены полумикроскопические потенциалы, обеспечивающие согласие с экспериментальными данными [20].

Система нелинейных уравнений для температуры электронного газа и решетки вокруг и вдоль траектории тяжелого иона урана с энергией 700 МэВ в никеле при постоянных значениях теплоемкости и теплопроводности, взятых при комнатной температуре, решена численно в аксиально-симметричной цилиндрической системе координат. На основе по-

лученных зависимостей температуры решетки от радиуса вокруг траектории иона и глубины можно сделать вывод, что ионизационные потери энергии иона урана в никеле достаточны для плавления и испарения материала с поверхности. Сделаны оценки размера областей с максимальным радиусом и глубиной в мишени, где происходят процессы плавления и испарения [21].

Получены результаты по измерению коэффициентов распыления чистых металлов, сплавов, аморфных сплавов, полупроводников и высокоориентированного пиролитического графита при облучении тяжелыми ионами высоких энергий. Введена трехмерная модель тепловой вспышки («горячего трека иона») с температурной зависимостью термодинамических параметров (удельной теплоемкости и теплопроводности) для однослойных моно- и поликристаллов, а также для многослойных структур (материалов). В работе [22] представлены результаты чи-

сленного решения введенной системы дифференциальных уравнений в частных производных для температур электронной и решеточной подсистем вокруг и вдоль траектории быстрого тяжелого иона в зависимости от времени t и координат — радиальной r и продольной z — с учетом возможных фазовых переходов, таких как плавление и испарение.

Смоделированы парциальные критические зависимости вида «ток–магнитное поле» в двухслойном симметричном джозефсоновском контакте. Численный эксперимент показал, что при нулевом коэффициенте взаимодействия между слоями этого контакта на критических кривых могут появиться скачки критических токов, соответствующие различным распределениям магнитных потоков в слоях. Этот факт позволяет математически интерпретировать результаты некоторых полученных в последнее время экспериментальных данных для двухслойных переходов как наличие точек разрыва непрерывности парциальных критических кривых [23].

В рамках метода среднего поля с доминантной магнитной компонентой показано, что откликом однородного магнитно-ориентированного нематического жидкого кристалла на циркулярно поляризованное оптическое поле является поперечная нематоматическая волна, в которой скорость несжимаемого потока и директор совершают связанные колебания, распространяющиеся вдоль оси магнитооптической анизотропии. Эффект может быть использован для передачи и записи информации [24].

Показано, что оптический отклик металлической частицы на инфракрасное длинноволновое излучение может быть смоделирован уравнениями полуклассической электронной теории в терминах поверхностных инерциально подобных волновых осцилляций электронов, управляемых силой Лоренца. Приведен расчет частоты размерно-независимых гиромагнитных плазмонных резонансов как функции мультипольного порядка электронных циклотронных осцилляций [25].

Рассмотрена система ловушек, каждая из которых содержит большое число бозе-конденсированных атомов. Обнаружено, что когда частота внешнего модулированного поля находится в резонансе с переходной частотой двух разных топологических когерентных мод, каждая ловушка становится

аналогом резонансного атома с конечным числом уровней. Предложен метод, регулирующий запутывание в такой системе мультиловушек и мультимодовых бозе-эйнштейновских конденсатов, связанных посредством этого общего резонансного модулирующего поля. Несколько режимов эволюции запутывания, регулируемых с помощью внешнего поля, проиллюстрированы численными расчетами. Предлагаемый метод может быть использован как для обработки информации, так и в квантовых вычислениях [26].

С помощью уравнения Пуассона–Больцмана вычислены распределения электростатических потенциалов фосфатных групп нескольких tRNAs, как свободных, так и связанных с белками, участвующими в трансляции: аминоктил-tRNA-синтетазой и фактором элонгации EF-Tu. Сравнение потенциалов различных tRNA позволило выявить области сильного отрицательного электростатического потенциала, которые инвариантны по отношению к типу tRNA. Как показывают проведенные теоретические расчеты, варьирование заряда tRNA и соответственное изменение электростатических потенциалов меченых tRNA зависят от структуры tRNA. Сравнение рассчитанных сдвигов рК у меченых tRNA с экспериментально наблюдаемыми сдвигами показывает, что полный заряд tRNA довольно большой и варьируется от -40 до -70 зарядов протона. Рассмотрены два механизма tRNA-белкового электростатического узнавания. Первый, более специфический, обусловлен ионизацией гистидинов синтетазы, второй связан с другими, менее специфичными взаимодействиями [27].

В настоящее время, после 120 лет теоретических и экспериментальных исследований, вопрос о макроархитектуре генома все еще остается нерешенным. Проблема пространственной укладки интерфейсных хромосом в гаплоидном ядре зародышевых клеток никогда не изучалась. Проведено 3D-моделирование укладки в пространстве части гаплоидного генома в зрелых спермиях *Drosophila melanogaster*. Для учета степени пространственной близости и визуализации петлевых структур хромосомы использовались современные методы 3D-моделирования с применением слайнов, библиотеки Open GL, языка Delphi, программы Gmax [28].

КОМПЬЮТЕРНАЯ АЛГЕБРА И КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

Изучена динамика клеточных автоматов с симметричными локальными правилами и действующих на решетках с высокой степенью симметрии [29]. Анализ клеточных автоматов такого рода может быть использован для моделирования таких трехвалентных

структур, как фуллерены и графены, которые рассматриваются в настоящее время как потенциальная основа будущих нанотехнологий.

Разработан алгоритм генерации разностных схем на ортогональных и однородных сетках для ли-

нейных уравнений в частных производных с двумя независимыми переменными, основанный на использовании техники разностных базисов Гребнера [30].

Найдена новая параметризация группового многообразия $SU(3)$, обобщающая известную параметризацию группы $SU(2)$ с помощью углов Эйлера [31]. Новая параметризация полезна для проведения гамильтоновой редукции в калибровочных моделях теории с $SU(3)$ -симметрией и для квантовых вычислений, основанных на использовании кутритов — квантовых частиц с тремя классическими состояниями.

Разработан численно-аналитический алгоритм восстановления дискретного эллиптического уравнения по части спектра и предписанным условиям симметрии собственных функций. Прямая задача решается в прямоугольнике $M \times N$ с нулевыми граничными условиями. Задача сводится к восстановлению симметричной пятидиагональной матрицы. Доказано, что при выполнении заданных условий симметрии рассматриваемая блочно-треугольная матрица и все ее блоки являются персимметричными. Такая матрица имеет $L < MN$ различных элементов и может быть восстановлена по L заданным собственным значениям. В численных экспериментах полиномиальные системы строились и решались

с применением системы аналитических вычислений REDUCE [32].

Сотрудниками ЛИТ и Института кибернетики Грузии проводятся исследования в области квантовой механики и квантовых вычислений. С помощью метода преобразования стационарных задач квантовой механики в нестационарные конструируются периодические потенциалы со сложной зависимостью от временной и координатной переменных. Исследуется проблема эволюции спина частицы в неоднородном T -периодическом магнитном поле, частным случаем которой является динамика спиновых состояний в однородном магнитном поле. Полученные в явном виде матрицы эволюции используются для построения универсального набора вентилей, необходимого для квантовых вычислений. В предлагаемом подходе эффект геометрической фазы при построении однокубитовых вентилей учитывается естественным образом [33].

Техника операторов сплетения применена к обобщенному уравнению Шредингера с дополнительной функциональной зависимостью в правой части уравнения [34]. Предложенные обобщенные преобразования переходят в преобразования Дарбу как для фиксированных значений энергии и орбитального момента, так и для случая с переменными значениями энергии и орбитального момента.

КОНФЕРЕНЦИИ, СОВЕЩАНИЯ

17–23 января в Дубне состоялась 13-я междисциплинарная конференция «Математика. Компьютер. Образование». Цель конференции — ознакомить участников с последними научными достижениями современной науки. Большинство участников — преподаватели вузов, которые одновременно занимаются как педагогической, так и научной работой.

10-й семинар по компьютерной алгебре состоялся в ЛИТ ОИЯИ 23–24 мая. В нем приняли участие более 30 ученых, представлявших Линц (Австрия), Турку (Финляндия), Москву, Санкт-Петербург, Белгород, Самару, Саратов, Тамбов, Тверь и Дубну. Основная цель семинара — обсудить современные методы, алгоритмы и системы компьютерной алгебры как со специалистами в области информатики, так и с математиками и физиками, применяющими компьютерную алгебру.

Вторая международная конференция «Распределенные вычисления и грид-технологии в науке и образовании» проходила в ЛИТ ОИЯИ с 26 по 30 июня. На конференцию приехало более 200 специалистов из 17 стран, а также из ЦЕРН и 46 университетов и исследовательских центров России. В ней приняли участие представители коммерческих структур, в частности, компаний CISCO и KRAFTWAY.

Научная программа, представленная 96 докладами и сообщениями, включала проблемы создания и опыт эксплуатации грид-инфраструктур в различных областях науки и образования; методы и технологии распределенных вычислений, вопросы архитектуры, алгоритмы; вопросы распределенной обработки и хранения данных; организацию сетевой инфраструктуры для распределенной обработки данных; алгоритмы и методы решения прикладных задач в распределенных вычислительных средах; теорию, модели и методы распределенной обработки данных; распределенные вычисления в рамках проектов ЛНС; технологии построения и опыт использования распределенных информационных грид-систем.

С 28 августа по 1 сентября в Словакии в Высоких Татрах проходила международная конференция «Математическое моделирование и вычислительная физика–2006», посвященная пятидесятой годовщине образования ОИЯИ. Организаторами вместе с ЛИТ были Институт экспериментальной физики Словацкой академии наук и Технический университет г. Кошице. Конференция с таким названием проводится ЛИТ ОИЯИ уже в четвертый раз. В 2006 г. по инициативе словацких коллег она впервые проводилась не в Дубне. На нее собрались известные специали-

сты в области математического моделирования и вычислительной физики из разных стран. Конференция наглядно продемонстрировала роль математического моделирования и вычислительных методов как ключевого фактора в современных научных исследованиях в различных областях знаний: физике частиц, физике твердого тела, гидродинамике, биологии, биохимии, материаловедении, квантовых вычислениях, экономике, информатике и т. д.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Акишин П. Г. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 2[131]. С. 105–110.
2. Akishin P. G. et al. JINR Commun. E10-2006-48. Dubna, 2006. P. 25.
3. Belotelov I., Lanyov A., Ososkov G. // Part. Nucl., Lett. 2006. V. 3, No. 4(133). P. 66–83.
4. Belotelov I., Lanyov A., Ososkov G. // Ibid. No. 5(134). P. 105–110.
5. Dikoussar N. D., Török Cs. // Mathematical Modelling. 2006. V. 18, No. 3. P. 23–40.
6. Polanski A., Petrochenkov S., Pohorecki W. // Nucl. Instr. Meth. A. 2006. V. 562. P. 764–766.
7. Lansberg J. P., Cudell J. R., Kalinovsky Yu. L. // Phys. Lett. B. 2006. V. 633. P. 301–308.
8. Воскресенская О. О. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 4(133). С. 43–47; Voskresenskaya O. O. et al. // Part. Nucl., Lett. 2007. V. 4, No. 1(137). P. 36–41.
9. Воскресенская О. О., Бакмаев С. М.-К. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 6(135). С. 33–37; Воскресенская О. О., Бакмаев С. М.-К. nucl-th/0610010; Препринт ОИЯИ P2-2006-158. Дубна, 2006 (направлено в «Вестник Томского гос. ун-та»).
10. Gevorkyan S. R., Tarasov A. V., Voskresenskaya O. O. hep-ph/0612129; Submitted to Phys. Lett. B.
11. Saha B. // Part. Nucl. 2006. V. 37, Suppl. 1. P. S13–S44; Saha B. // Intern. J. Theor. Phys. 2006. V. 45(5). P. 983–995; Saha B. // Astrophysics and space science. 2006. V. 302. P. 83–91; Saha B. // Phys. Rev. D. 2006. V. 74. P. 124030; Saha B. // Gravitation & Cosmology. 2006. V. 12, No. 2–3 (46–47). P. 215–218.
12. Saha B., Rikhvitsky V., Visinescu M. // Mod. Phys. Lett. A. 2006. V. 21, No. 11. P. 847–861.
13. Saha B., Rikhvitsky V. // Physica D. 2006. V. 219. P. 168–176.
14. Chuluunbaatar O. et al. // J. Phys. B. 2006. V. 39. P. 243–269.
15. Chuluunbaatar O. et al. // Proc. of SPIE. 2006. V. 6165. P. 66–82.
16. Chuluunbaatar O. et al. // Ibid. P. 83–98.
17. Watanabe N. et al. // AIP Conf. Proc. 2006. V. 811. P. 96–101; Chuluunbaatar O. et al. // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. P. 014703.
18. Земляная Е. В., Лукьянов В. К., Лукьянов К. В. // ЯФ. 2006. Т. 69, вып. 2. С. 262–275; Zemlyanaya E. V. et al. // Proc. of 25th Intern. Workshop on Nuclear Theory (June 26–July 1, 2006, Rila Mountains, Bulgaria) / Ed. S. Dimitrova. Sofia: Diomira, 2006. P. 301–312.
19. Лукьянов В. К., Метавей З., Земляная Е. В. // ЯФ. 2006. Т. 69, вып. 8. С. 1409–1415; Ханна К. М. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 6[135]. С. 105–112.
20. Лукьянов К. В. и др. Препринт ОИЯИ P4-2006-154. Дубна, 2006 (направлено в «Изв. РАН, сер. Физ.»); Лукуанов К. В. et al. nucl-th/0610119. Submitted to Proc. of the Intern. Symp. on Exotic Nuclei «EXON-2006», Khanty-Mansiysk, Russia, 17–22 July 2006.
21. Амирханов И. В. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 1[130]. С. 63–75.
22. Amirkhanov I. V. et al. // Crystallography Reports. 2006. V. 51, Suppl. 1. P. S32–S43; Амирханов И. В. и др. // ЭЧАЯ. 2006. Т. 37, вып. 6. С. 837–866.
23. Атанасова П. Х., Бояджиев Т. Л., Димова С. Н. // ЖВМиМФ. 2006. Т. 46, № 4. С. 666–679.
24. Bastrukov S. et al. // J. of Magnetism and Magnetic Materials. 2006. V. 304. P. e353–e355
25. Bastrukov S., Lai Pik-Yin. // Surface Rev. and Lett. 2006. V. 13, Iss. 01. P. 81–86.
26. Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Laser Phys. 2006. V. 16. P. 354–359; Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. P. 022335-10; Yukalov V. I., Yukalova E. P. // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. P. 063623-9.
27. Polozov R. V. et al. // Biochemistry. 2006. V. 45, No. 14. P. 4481–4490.
28. Александров И. Д. и др. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, № 6(135). С. 58–73.
29. Korniyak V. V. Computer Algebra in Scientific Computing // CASC 2006. LNCS 4194. Springer-Verlag. 2006. P. 240–250; math-ph/0605040.
30. Gerdt V. P., Blinkov Yu. A., Mozhilkin V. V. // Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications (SIGMA). 2006. V. 2. P. 051; math.RA/0605334.
31. Gerdt V. et al. // J. Math. Phys. 2006. V. 47, No. 10. P. 112902; hep-th/0511245.
32. Сердюкова С. И. // Докл. РАН. 2006. Т. 406, № 2. С. 160–164.
33. Suzko A. A., Giorgadze G. // Contemporary Mathematics and its Applications. 2006 (submitted).
34. Сузько А. А., Гиоргадзе Г. // ЯФ. 2007. Т. 70, № 3.