

ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Научная программа Лаборатории информационных технологий в 2003 г. определялась тремя темами первого приоритета Проблемно-тематического плана научных исследований и международного сотрудничества ОИЯИ. Сотрудники ЛИТ участвовали в исследованиях по 13 темам на уровне проектов и в 17 темах в рамках сотрудничества. Основная цель лаборатории — выполнение работ в рамках тем «Информационное, компьютерное и сетевое обеспечение деятельности ОИЯИ», 09-6-1048-2003/2007, рук. В.В.Иванов, В.В.Кореньков и П.В.Зрелов, и «Компьютерная физика для теоретических и экспериментальных исследований», 09-6-1041-2002/2004, рук. И.В.Пузынин и А.Полянки. Результаты исследований по указанным темам опубликованы в реферируемых журналах, трудах научных конференций, в препринтах и сообщениях ОИЯИ.

ВНЕШНИЕ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИИ

В настоящее время ОИЯИ арендует канал компьютерной связи в 45 Мбит/с с Москвой у Федерального государственного унитарного предприятия «Космическая связь» (ГПКС). ОИЯИ имеет доступ к российским сетям и информационным ресурсам (канал с пропускной способностью до 45 Мбит/с), а также доступ к международному каналу через сеть RBNET в общем потоке данных 622 Мбит/с и с гарантированной полосой в 10 Мбит/с. На рис. 1 приведено современное состояние внешних каналов, используемых ОИЯИ.

На рис. 2 приведено распределение по месяцам входящего и исходящего трафика ОИЯИ за 2003 г. Общий входящий трафик составил 19,89 Тбайт (9,73 Тбайт в 2002 г.), а исходящий — 24,43 Тбайт (1,92 Тбайт в 2002 г.).

В 2003 г. ряд научных проектов, представленных с участием ЛИТ, получили гранты Комиссии Европейского сообщества в рамках сотрудничества Россия–ЕС, INTAS, а также 12 грантов Российского фонда фундаментальных исследований. Семь проектов РФФИ посвящены созданию и развитию информационных, вычислительных и телекоммуникационных ресурсов, остальные пять представляют собой инициативные научные проекты.

ЛИТ была организатором симпозиума «Квантовая физика и коммуникации» (Дубна, 29 июля – 2 августа 2003 г.) и 19-й Международной конференции по ядерной электронике и компьютерингу (NEC'2003) (Варна, Болгария, 15–20 сентября 2003 г.).

Выпущен очередной «Информационный бюллетень ЛИТ» (ОИЯИ, 4-8160. Дубна, 2003; http://lit.jinr.ru/inf_bul_2/). Он содержит информацию для пользователей сетевых и информационно-вычислительных ресурсов ОИЯИ.

В табл.1 показано распределение трафика по подразделениям ОИЯИ (> 0,300 Тбайт по входящему трафику).

Таблица 1

Подразделение	Входящий трафик, Тбайт	Исходящий трафик, Тбайт	Входящий трафик, %	Исходящий трафик, %
ЛИТ	3,52	7,92	17,7	32,4
ЛЯП	2,84	4,33	14,28	17,72
Прокси + серверы	2,68	1,82	13,47	7,44
ЛЯР	2,29	1,36	11,5	5,58
ЛФЧ	2,04	0,849	10,25	3,39
ЛТФ	1,65	1,13	8,28	4,63
ЛВЭ	1,64	2,79	8,23	12,0
Ун-т «Дубна»	1,1	0,539	5,53	2,16
ЛНФ	0,985	2,27	4,84	9,31
Управление	0,399	0,761	1,96	3,04

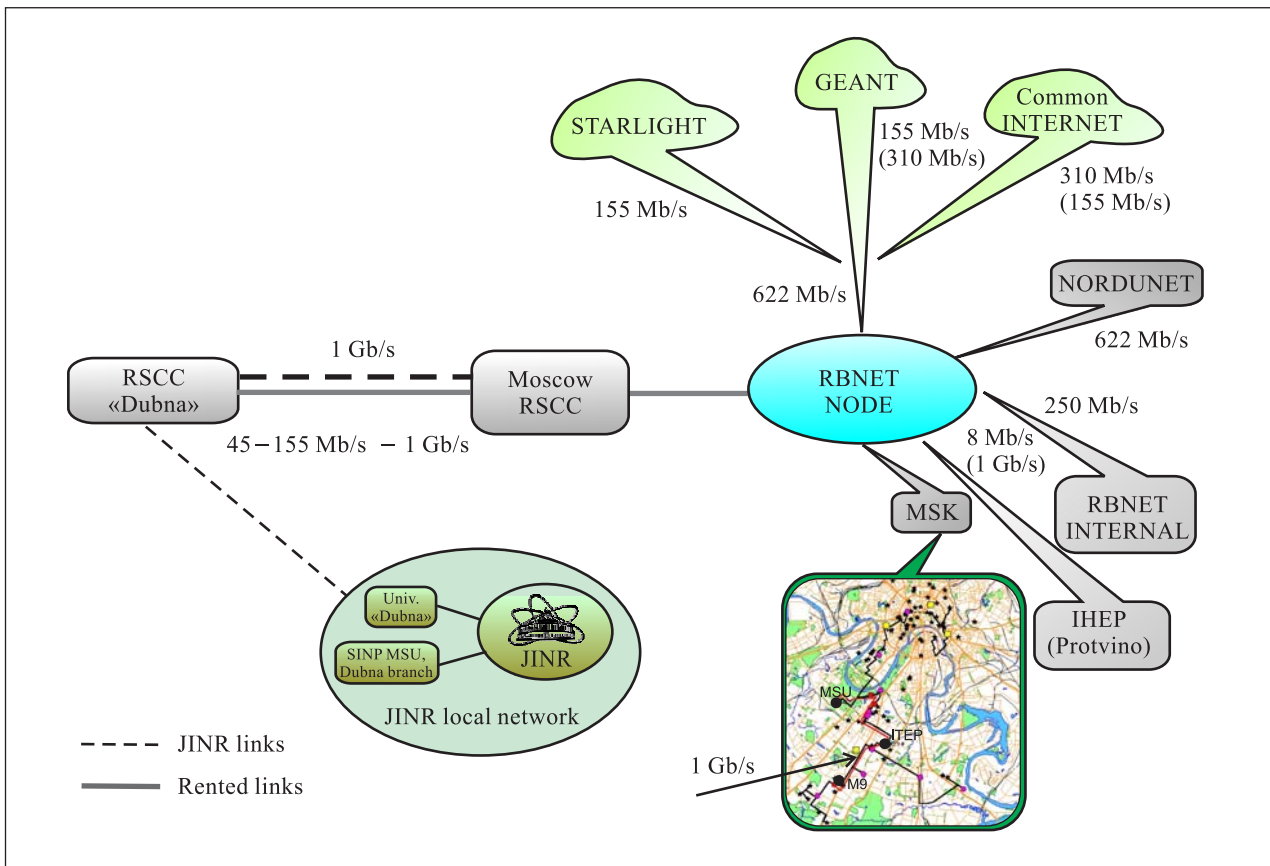


Рис. 1. Современное состояние внешних каналов России, используемых ОИЯИ

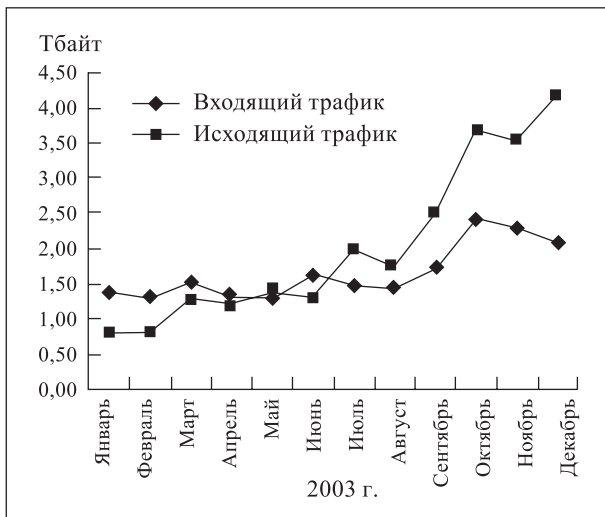


Рис. 2

Систематическая работа по управлению локальной сетью ОИЯИ выполнялась Центром управления сетью (<http://noc.jinr.ru/>). Текущая статистика о работе локальной сети ОИЯИ размещена на сайте http://noc.jinr.ru/inform/inf_main_stat.shtml.

ЛОКАЛЬНАЯ СЕТЬ ОИЯИ

В настоящее время база данных IP-адресов содержит 4506 зарегистрированных элементов локальной сети ОИЯИ (4053 в 2002 г.). Как отмечалось в Проблемно-тематическом плане на 2003 г., одной из основных задач по разработке информационной, вычислительной и телекоммуникационной структуры в ОИЯИ считается выполнение работ по реализации первой стадии выбранного варианта опорной сети ОИЯИ на основе Gigabit Ethernet.

Ядром локальной сети ОИЯИ, основанной на технологии Gigabit Ethernet, является коммутатор Cisco Catalyst 6509 с Gigabit Interface на восемь портов. Коммутаторы Cisco Catalyst 3550 установлены в семи лабораториях и административном корпусе ОИЯИ. Все компоненты гигабитного оборудования связаны между собой новым 16-жильным одномодовым оптическим кабелем длиной 10300 м (рис. 3). Для защиты локальной сети ОИЯИ по всему периметру установлены два устройства межсетевой защиты Cisco PIX-525 (одно находится в активном режиме, а второе включается в работу в случае сбоя первого).

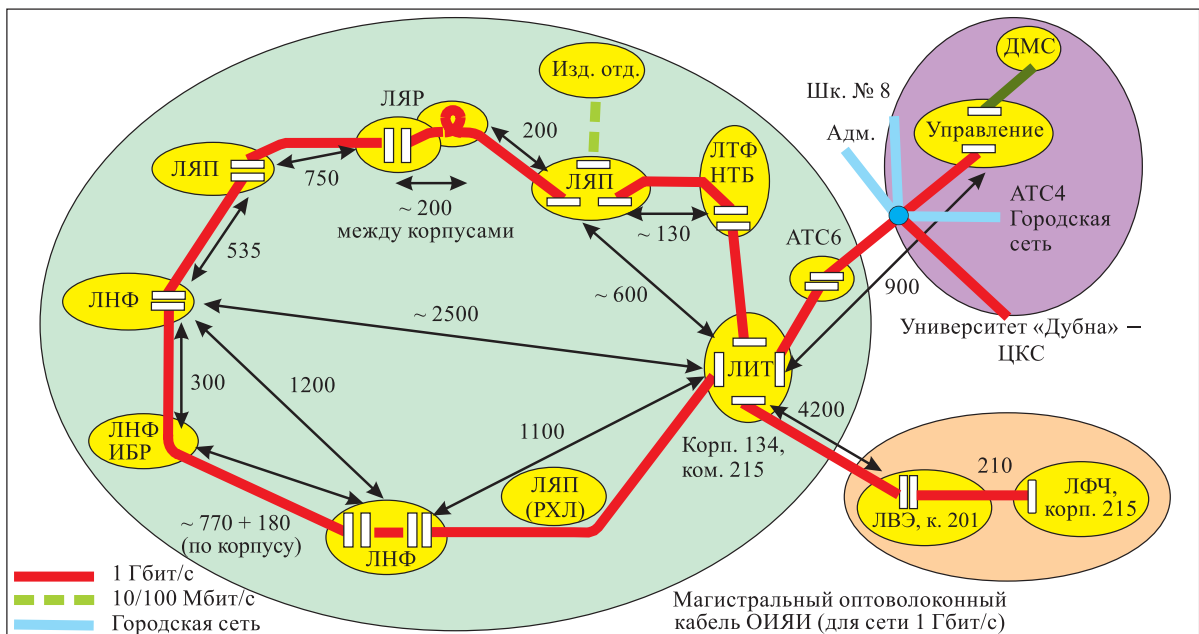


Рис. 3. Гигабитная опорная сеть ОИЯИ

Проводились работы по изучению характерных особенностей сетевого трафика. Для реконструкции динамической системы, описывающей информационный трафик в локальной сети среднего размера, применены методы нелинейного анализа и проточная нейронная сеть. Нейронная сеть, обученная на измерениях сетевого трафика, воспроизвела статистическое распределение информационного потока, которое хорошо описывается логнормальным законом. Анализ принципиальных компонентов измерений трафика показал, что уже несколько лидирующих компонентов формируют логнормальное распределение, в то время как остаточные компоненты играют роль случайного шума. Этот результат подкреплен совместным статистическим, вейвлет- и фурье-анализом измерений трафика. Логнормальное распределение информационного потока и мультипликативный характер временной серии подтверждает применимость схемы, разработанной А. Колмогоровым к однородной фрагментации крупинки, также и для сетевого трафика [1].

Распределенные информационные системы, центральный информационно-вычислительный комплекс ОИЯИ

Центральный информационный вычислительный комплекс (ЦИВК) ОИЯИ является частью Российского информационно-вычислительного комплекса,

созданного для обработки информации с Большого адронного коллайдера (ЛHC). Он включает в себя интерактивный кластер общего доступа, вычислительную ферму для выполнения задач моделирования и обработки данных для больших экспериментов, вычислительную ферму для задач проекта ЛHC, вычислительную ферму для выполнения параллельных вычислений на базе современных сетевых технологий (MYRINET, SCI и т.д.), ресурсы памяти большой емкости на дисковых RAID-массивах и ленточные роботы.

Производительность ЦИВК ОИЯИ составляет 4,3 KSPI95, дисковое пространство 7,7 Тбайт, автоматизированная ленточная библиотека имеет емкость 16,8 Тбайт. Среднегодовая загрузка фермы составила 25%. В октябре 2003 г. загрузка равнялась 60,98%. Ресурсы ЦИВК ОИЯИ использовались в экспериментах E391A (КЕК), KLOD, COMPASS, D0, DIRAC, CMS, ALICE для массового моделирования событий, моделирования и анализа экспериментальных данных. Для экспериментов ALICE, ATLAS и CMS проводились сеансы массового моделирования физических событий в рамках участия ОИЯИ в DC04 (Data Challenge 2004).

Более 300 сотрудников ОИЯИ и других научно-исследовательских центров являются пользователями ЦИВК ОИЯИ. В табл.2 представлена статистика использования процессорного времени на вычислительных фермах ЦИВК по подразделениям.

Таблица 2

Процессорное время, %		Процессорное время, %		Процессорное время, %	
ЛHC сеансы массового моделирования	33,32	ЛФЧ	6,70	Прочие организации	4,47
ЛЯП	20,77	ЛНФ	5,78	ЛВЭ	2,57
ЛТФ	18,71	ЛИТ	5,23	ЛЯР	2,44

Вычислительный сервис и создание Grid-сегмента в ОИЯИ

В 2003 г. активно велись работы по использованию Grid-технологий для обработки экспериментальных данных. В настоящее время научное сообщество начинает интенсивно использовать концепцию Grid, которая предполагает создание такой инфраструктуры, которая бы смогла обеспечить глобальное интегрирование информационных и вычислительных ресурсов. ОИЯИ принимает активное участие в этом процессе. Проект LHC, который является уникальным как по масштабам получаемых данных, так и с точки зрения применяемых компьютерных технологий, позволяет провести обработку и анализ экспериментальных данных с использованием технологии Grid. Аналитический обзор в журнале «Открытые системы», подготовленный совместно с НИИЯФ МГУ и РИЦ «Курчатовский институт», посвящен анализу работ, выполненных в этой области в ОИЯИ и в российских центрах [2].

Велись работы по созданию системы глобального мониторинга ресурсов крупномасштабной виртуальной организации России, включающей сегменты локальных сетей ряда институтов (НИИЯФ МГУ, ОИЯИ, ИТЭФ, ИФВЭ, ИПМ РАН) на основе архитектуры Grid. Продолжалась адаптация и поддержка новых версий библиотеки ANAPHE (первоначально LHC++) на платформах Linux, Windows и Sun Solaris. Осуществлялась поддержка программного обеспечения для LHC-экспериментов (ATLAS, ALICE и CMS) и для экспериментов, не связанных с LHC. Проведены измерения производительности пакета Globus Toolkit 3 (GT3) в условиях высокой загрузки. Установлен AliEn-сервер для распределенной обработки данных эксперимента ALICE в России. На ЦИВК ОИЯИ установлена и протестирована система Castor.

В течение 2003 г. ОИЯИ участвовал в сеансах массового моделирования событий для эксперимента CMS. С помощью программы CMSIM v.133 получено 250000 событий. Объем сгенерированных данных составил 320 Гбайт. Для моделирования событий использовался новый инструмент — Grid-ресурс-брокер (Storage Resource Broker (SRB)). Программа

SRB, установленная в ОИЯИ, обеспечивает прямой доступ к общим базам данных эксперимента CMS на сервере в Великобритании (Бристоль) и открывает новые возможности для хранения и обмена данными в рамках коллаборации CMS.

Сотрудники ЛИТ принимают участие в разработке средств контроля для вычислительных кластеров с большим количеством узлов (10000 и более), которые используются в инфраструктуре EU Data Grid. В рамках задачи по управлению и контролю отказоустойчивости таких структур создана система Correlation Engine. Эта система осуществляет оперативное обнаружение аварийных состояний в узлах кластеров и принятие мер для предотвращения в этой связи аварийных ситуаций. Прототип Correlation Engine установлен в ЦЕРН и ОИЯИ для учета аварийных состояний узлов кластеров [3].

В 2003 г. проведены опытные сеансы по передаче данных из Протвино (sirius-b.ihep.su; ОС Digital UNIX Alpha Systems 4.0) на систему массовой памяти ATL-2640 в Дубне (dtmain.jinr.ru; ОС HP-UX 11.0) для оценки пропускной способности и стабильности системы передачи данных, включая каналы связи и массовую память (OmniBack disk agent в Протвино и OmniBack tape agent в Дубне). Сеансы прошли без аварийных сбоев. Средняя скорость передачи составила 480 Кбит/с. При этом максимальная скорость передачи составила 623 Кбит/с, а минимальная — 301 Кбит/с. (Расстояние между Дубной и Протвино примерно 250 км; пропускная способность канала связи Протвино–Москва 8 Мбит/с.)

Хранение данных, полученных в процессе массового моделирования событий в сеансах CMS, обеспечивалось системой Omnistorage. Около 1 Тбайт данных, смоделированных в НИИЯФ МГУ, было передано в Дубну на автоматизированную ленточную библиотеку ATL-2640.

Продолжалось сопровождение библиотеки программ ОИЯИ (JINRLIB), которое включает в себя реализацию в ОИЯИ электронного доступа к CPCLIB, CERNLIB (<http://www.jinr.ru/programs/>), адаптацию программ на компьютерных платформах ОИЯИ и пополнение библиотеки JINRLIB (добавлено и протестировано около 80 новых программ).

БАЗЫ ДАННЫХ И WWW-СЕРВИС

В 2003 г. осуществлялась систематическая поддержка и обслуживание ранее созданных баз данных и информационных систем с учетом потребностей пользователей, в число которых входили:

- система учета и ведения статистики работы базовых установок Института (<http://iis.jinr.ru/basic-fac/>);

- система подготовки библиографических данных по физике высоких энергий для базы данных PPDS (<http://www.jinr.dubna.su/~diginfo/>) и оцифровки графиков по заявкам пользователей. Более 40 статей занесены в базу данных PPDS. Эта работа выполнялась совместно с ИФВЭ, Протвино, Национальной лабораторией

- рией в Брукхейвене и другими физическими центрами. По запросам от физиков ОИЯИ и зарубежных ученых оцифровано 235 графиков;
- информационная система «Проблемно-тематический план ОИЯИ» (<http://iis.jinr.ru/tp/>);
 - веб-портал для проекта «LHC Computing GRID» в России (<http://lcg.jinr.ru/>);
 - информационный веб-сайт по работе над Grid в ОИЯИ (<http://Grid.jinr.ru/>);
 - прототип веб-портала RDIG-EGEE (<http://www.egee-rdig.ru/>);
 - электронный каталог научно-технической библиотеки ОИЯИ с 2000 г. (<http://lib.jinr.ru/dmitry/uni/rus/simple.html>);
 - система пересылки в режиме реального времени списков препринтов и сообщений ОИЯИ в НТБ ОИЯИ (<http://lib.jinr.ru/maillist/newslistru.html>).

Продолжались работы по развитию WWW-сервиса на базовых информационных серверах ОИЯИ: www.jinr.ru и lit.jinr.ru. К основным результатам этой работы можно отнести:

- размещение и сопровождение в режиме «Web-hosting» информационных сайтов ряда подразделений ОИЯИ и внешних организаций;
- внедрение и сопровождение совместно со службой главного инженера ОИЯИ информационной системы по базовым установкам

ОИЯИ (нуклотрон, У-400, У-400М, ИВР-2, фазотрон, проект IREN);

- отображение текущего состояния технического и программного обеспечения ЦИВК ОИЯИ и средств связи.

Обеспечено устойчивое сопровождение одного из основных FTP-серверов общего назначения: faxe.jinr.ru. Этот же сервер использовался для поддержки и динамической загрузки антивирусных программ.

Сотрудниками ЛИТ выполнены работы для НТО АСУ ОИЯИ по программному обеспечению и централизованной поддержке баз данных административно-хозяйственного профиля, в том числе:

- модернизация интерфейса и содержимого базы данных «Кадры ОИЯИ»;
- создание и модификация комплекса программ по учету валютного запаса в среде общей системы 1С для бухгалтерии ОИЯИ;
- создание журнала регистрации счетов в среде 1С и документа «Оказание услуг ОГЭ».

Продолжались работы по развитию и сопровождению (раздел js сервера dbserv.jinr.ru) архива документации и программных средств, относящихся к современным технологиям «промежуточного слоя». Разработаны программы на языке Java для автоматизации развертывания клиентских и серверных приложений по указанной технологии.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА

В 2003 г. сотрудниками ЛИТ опубликовано более 150 научных работ в реферируемых журналах, докладах на научных конференциях и сообщениях ОИЯИ.

Выполнены исследования по улучшению качества спектров рассеяния, которое достигается благодаря использованию разрешения спектрометра как при вейвлет-фильтрации, так и при традиционных

методах сглаживания данных малоуглового рассеяния нейтронов (рис. 4). Такой метод приводит к лучшим кривым фитирования, задаваемым формфактором модели на следующем этапе обработки данных. Кроме того, вейвлет-анализ позволяет выделять и анализировать фоновую составляющую (шум) и вводить инструментальные поправки [4].

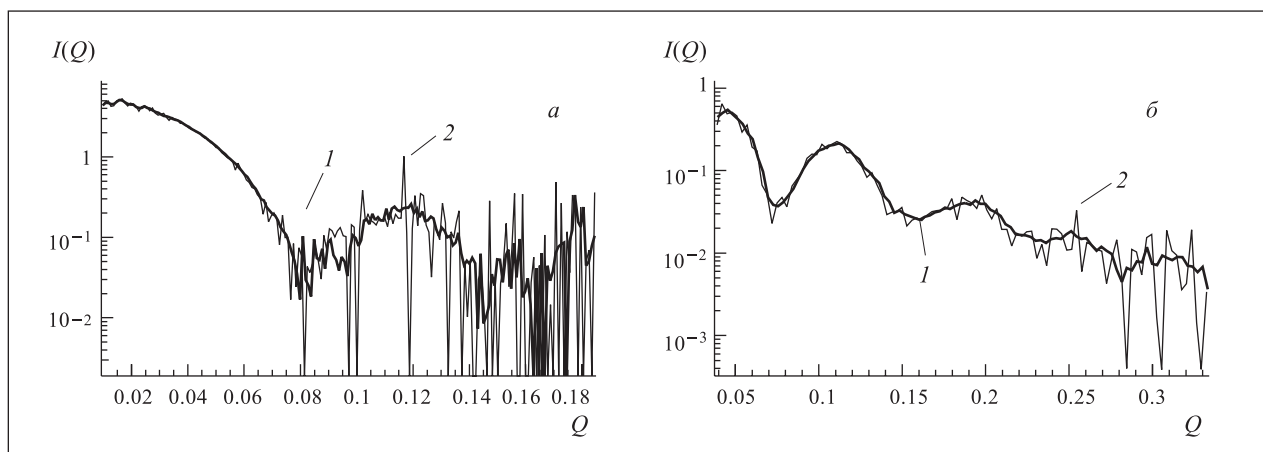


Рис. 4. Результаты обработки методом скользящего окна (кривая 1) поверх исходных «сырых» данных (кривая 2) для нового (а) и старого (б) кольцевого детектора ЮМО

Предложена новая экспериментальная схема для квантовой телепортации тяжелой материи. Показано, что стандартная экспериментальная техника, используемая в ядерной физике, может с успехом применяться для телепортации спиновых состояний атомных ядер. Установлено, что нет никаких теоретических запретов на осуществление полного белловского измерения. Это означает, что реализация всех четырех возможных квантовых каналов передачи информации осуществима, по крайней мере теоретически [5].

Проведены вычисления сечений однократной ионизации атомов гелия из основного и первого возбужденного состояний при релятивистских столкновениях с полностью ободранными ионами урана, обладающими зарядом $Z_p = +92$ и кинетической энергией 1 ГэВ/нуклон. Учет взаимодействия налетающей частицы с электронами мишени проводился с помощью потенциалов Лиенара–Вихерта в рамках приближения прицельного параметра. Получены дифференциальные сечения ионизации для энергий вылетевшего электрона $E < 37$ эВ ниже порога $n = 2$ иона He^+ . При вычислениях использовались нерелятивистские вариационные волновые функции начального и конечного состояний атома гелия, учитывающие электрон-электронные корреляции [6]. Предложен полурелятивистский симметрический эйконольный вариант модели искаженных волн, позволяющий выйти за рамки первого борновского приближения и оценить вклад двухцентровых эффектов в задачах о релятивистских столкновениях атомов с тяжелыми ионами [7].

Проведен комплексный анализ экспериментальных данных упругого, неупругого рассеяния α -частиц и полных сечений реакций на ядрах $^{90,94}\text{Zr}$. Получены значения деформационных длин и отношений нейтрон-протонных мультипольных матричных элементов для 2_1^+ - и 3_1^+ -состояний ядер $^{90,92,94,96}\text{Zr}$ для разных типов налетающих частиц и проведен их сравнительный анализ. С целью выяснения природы обнаруженных фазовых сдвигов в рамках единого подхода проведен анализ экспериментальных данных неупругого рассеяния α -частиц с энергиями 35,4; 40,0; 50,1 и 65,0 МэВ на ядрах $^{90,94}\text{Zr}$ [8].

В рамках модели тяжелого фермиона, использованной для описания струи глюона, порождаемой поляризованным протоном, рассчитана односпиновая корреляция в дифференциальном сечении процесса образования пиона при протон-протонном столкновении, возникающая из-за интерференции механизмов обмена с одним и двумя глюонами в канале рассеяния. Показано, что измерение односпиновой корреляции может дать информацию об интересах оддерона и померона. Численный анализ в рамках модели позволяет вычислить эти характеристики [9].

Эйконольные фазы ядро-ядерного рассеяния рассматриваются в подходе Глаубера–Ситенко с использованием реалистических (типа фермиевских)

плотностей ядер. Разработан метод восстановления из полученных фаз оптического потенциала вудс-саксоновского вида. Проведено сравнение восстановленных потенциалов с потенциалами прямой подгонки под эксперимент, а также с экспериментальными данными по дифференциальным сечениям упругого рассеяния и полным сечениям реакций [10].

Формфакторы ядра ^{12}C рассчитаны в плоско-волновом борновском приближении (БП), а также при учете искажения электронных волн в кулоновском поле ядра как в рамках высокоэнергетического приближения (ВЭП), так и путем численного решения уравнения Дирака (РУД). Ядерные волновые функции включают в себя особенности, связанные с альфа-кластеризацией и короткодействующими корреляциями нуклонов. Показано, что учет таких корреляций оказывает влияние на формфакторы в области сравнительно больших переданных импульсов, где значительные различия имеют место также при использовании различных методов расчета БП, ВЭД, РУД электронных волн. Сделан вывод о том, что метод РУД предпочтителен при изучении влияния на формфакторы корреляций нуклонов на малых и средних расстояниях [11].

Разработан метод построения периодически зависящих от времени гамильтонианов, для которых системы уравнений Шредингера допускают аналитические решения. Метод основан на стационарных точно решаемых задачах и специальных, зависящих от времени, калибровочных преобразованиях, переводящих стационарные задачи в нестационарные, при этом важен выбор начальных условий. В замкнутом аналитическом виде построен новый класс 2×2 -периодически зависящих от времени гамильтонианов и вычислены соответствующие ему циклические решения. В частности, получены зависящие от времени гамильтонианы, средние значения которых, а также средние значения проекции спина, вычисленные по циклическим решениям, не зависят от времени. Как следствие, подход может быть использован для моделирования квантовых динамических потенциальных ям, обладающих эффектом локализации частиц [12].

Техника операторов сплетения применена к разностным уравнениям Шредингера с операторнозначными коэффициентами. Показано, что эти уравнения возникают естественным образом, когда при решении многоканальных уравнений Шредингера используется дискретный базис. Найдены новые семейства точно решаемых гамильтонианов [13].

Прохождение быстрых ди-мезоатомов через среду рассмотрено с квантово-механической точки зрения. Получен набор квантово-кинетических уравнений для элементов матрицы плотности, описывающих эволюцию их собственных состояний. Показано, что вероятностное описание внутренней динамики водородоподобных атомов невозможно даже при до-

статочны низких энергиях из-за «случайного» вырождения их энергетических уровней [14].

В рамках модели Намбу–Иона-Лазинио с тремя кварками изучены аномальные распады $\pi^0\eta \rightarrow \gamma\gamma$ как в вакууме, так и в β -равновесной кварковой материи. Вероятность этих распадов уменьшается с ростом плотности, указывая на то, что аномальные мезонные взаимодействия зависят от среды [15]. Изучено поведение нейтральных псевдоскалярных мезонов π^0 , η и η' как в вакууме, так и в β -равновесной горячей и плотной кварковой материи. Рассмотрено три различных сценария: нулевая плотность и конечная температура; нулевая температура и конечная плотность асимметричной материи со странными валентными кварками и без них; конечная температура и плотность. Найдено, что поведение основных наблюдаемых характеристик мезонов существенно зависит от частичного восстановления киральной симметрии в нестранном и странном секторах. При высокой плотности и нулевой температуре найдено, что масса η' увеличивается, отклоняясь от массы η даже в материи без странных валентных кварков, а вероятность распадов уменьшается с ростом плотности, указывая на то, что аномальные мезонные взаимодействия сильно зависят от среды [16].

Ведутся исследования по развитию макроскопической модели диссипативной магнитоупругой динамики вязкой спин-поляризованной ядерной материи в контексте сейсмической активности парамагнитной нейтронной звезды. Источник магнитного поля такой звезды связывается с парамагнетизмом Паули барионной материи, наведенным магнитным полем, вмороженным в звезду в процессе гравитационного коллапса массивной звезды-предшественницы. Особое внимание уделяется влиянию сдвиговой вязкости несжимаемой ядерной материи на нерадиальные магнитоупругие крутильные колебания, вызываемые звездотрясениями. С акцентом на том факте, что этот

тип колебаний является уникальным для сейсмологии парамагнитной нейтронной звезды, показано, что высокочастотные моды затухают быстрее, чем низкочастотные. Полученные аналитические формулы для периода и времени затухания этих мод явно демонстрируют зависимость этих характеристик сейсмических колебаний от магнитной проницаемости и вязкости, значения которых берутся из ранних и недавних работ по транспортным коэффициентам ядерной материи. Показано также, что вязкость оказывает существенное влияние на продолжительность магнетокрутильных колебаний, но практически не влияет на периоды этой сейсмической моды, которые совпадают по длительности с периодами магнетаров — молодых нейтронных звезд, являющихся источниками мягкого γ -излучения и аномальных рентгеновских пульсаров. Представлены аргументы, что периодическое пульсирующее γ - и рентгеновское излучение магнетара можно интерпретировать как проявление слабо затухающих сейсмических магнетокрутильных колебаний парамагнитной нейтронной звезды [17].

На языке СИ разработан переносимый универсальный программный комплекс для численно-аналитического решения систем алгебраических уравнений с конечным числом корней. Данный комплекс основан на оригинальных алгоритмах, разработанных в ЛИТ, для преобразования исходной системы уравнений в эквивалентную ей, так называемую инволютивную форму, удобную как для исследования общих свойств решений, так и для их явного нахождения [18].

Достигнуто существенное улучшение алгоритма, реализованного в виде программы на языке СИ, вычисления кохомологий алгебр и супералгебр Ли векторных полей, что важно для эффективного исследования общематематических свойств современных суперсимметричных моделей теории поля и физики частиц [19].

ПРИКЛАДНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Формирование структур сильного выгорания двуокиси урана в материалах ядерного топлива, известное как *pin*-эффект, привлекает внимание главным образом из-за своего возможного катастрофического влияния на рабочее состояние современных атомных электростанций. Этот процесс вызывает также большой научный интерес потому, что физические механизмы и соответствующие параметры до сих пор плохо изучены.

Предложен новый, основанный на клеточных автоматах (КА), подход для обработки и моделиро-

вания структурной динамики ядерного топлива при различных степенях выгорания ядерного топлива. Получены указания на существование процессов самоорганизации в топливе при сильных выгораниях. Было установлено, что фрактальный размер поверхностных структур во многом зависит от радиационного повреждения материала [20].

Микрофотография первоначального образца, преобразованного в рабочее поле КА, показана на рис. 5. Черные точки — это поры, заполненные газовыми продуктами деления, а белый фон —

это керамическая двуокись урана UO_2 . Результаты мо делирования КА Изинга эволюции образца под влиянием температурных изменений показаны на

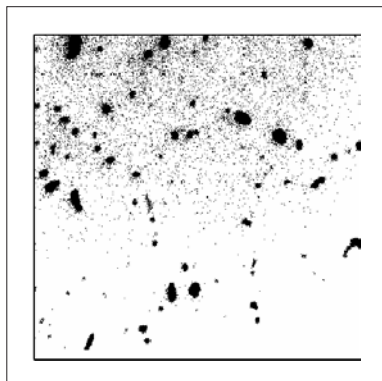


Рис. 5.

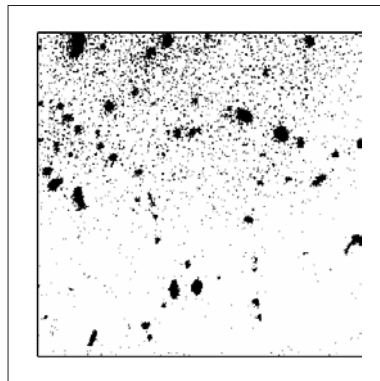


Рис. 6.

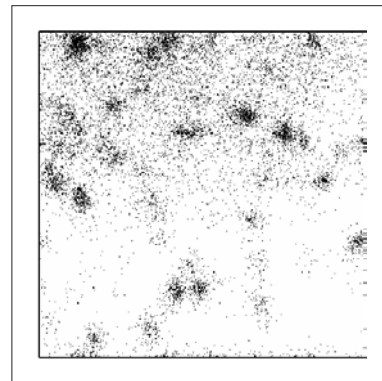


Рис. 7.

рис.6 и 7. На них четко видны процессы объединения пор или их дробление в зависимости от температуры.

МЕЖДУНАРОДНОЕ СОТРУДНИЧЕСТВО

В сотрудничестве с учеными из Технического университета в Кошице, Словацкая Республика, и Лаборатории вычислительной и статистической физики Академии Синика, Тайвань, продолжались исследования по математическому моделированию образования трехмерных структур белков.

Для исследования термодинамических свойств и трехмерных структур макромолекул, таких как белки, важно иметь эффективный алгоритм вычисления доступной для растворителя поверхности и объема макромолекул, помещенных в растворитель. Для решения этой задачи предложен новый аналитический метод, позволяющий свести задачу к вычислению двукратных интегралов по круговым траекториям на плоскости, на которую проектируются атомы молекулы. Такой алгоритм удобен для распараллеливания. Тестирование программы, реализующей предложенный алгоритм, продемонстрировало высокую точность и эффективность метода [21].

Предложен алгоритм и создан комплекс программ PBSOLVE для численного решения линейного уравнения Пуассона–Больцмана, описывающего электростатический потенциал взаимодействия атомов молекул с атомами растворителя. Для дискретизации исходной задачи использован метод конечных разностей, а для решения алгебраических уравнений применялся метод верхней релаксации. Эффективность программы проверена на малом пептиде Met-Enkephalin [22].

В сотрудничестве с Техническим университетом г. Аахена, Германия, разработанные в ЛИТ алго-

ритмы построения инволютивных базисов реализованы в виде Maple-пакетов «Involutive» и «Janet». Эти алгоритмы предназначены для вычисления базисов Жане для систем алгебраических уравнений и линейных систем уравнений в частных производных соответственно [23].

С помощью разработанного программного комплекса [18], совместно с Институтом ядерной физики Чешской академии наук, г. Ржеж, впервые найдены условия точной разрешимости уравнения Шредингера для двухпараметрического класса центральных потенциалов полиномиального типа при достаточно больших значениях пространственной размерности. При выполнении этих условий найдены решения переопределенной системы нелинейных уравнений (системы Магьяри), эквивалентной задаче решения уравнения Шредингера [24].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Akritas P. et al. // Chaos, Solitons & Fractals. 2003. V. 17. P. 305–309;
Antoniou I. et al. // Proc. of the Intern. Conf. Mathematics and Informatics for Industry (МИ'2003), Thessaloniki, Greece, April 14–16, 2003. P. 170–181;
Antoniou I. et al. // Nucl. Instr. Meth. A. 2003. V. 502. P. 768–771;
Antoniou I. et al. // Physica A. 2003. V. 324. P. 733–753.
2. Ильин В., Кореньков В., Солдатов А. // Открытые системы. 2003. № 1. С. 56–66.
3. Pose V., Panzer-Steindel B. // Nucl. Instr. Meth. A. 2003. V. 502. P. 478–480.

4. *Soloviev A. et al.* // *Ibid.* P. 500–502.
5. *Ivanov V. V. et al.* // *Part. Nucl., Lett.* 2003. No. 1[116]. P. 96–107.
6. *Selin A. V., Ermolaev A. M., Joachain C. J.* // *Phys. Rev. A.* 2003. V. 67. P. 012709.
7. *Selin A. V., Ermolaev A. M., Joachain C. J.* // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2003. V. 36. P. L303–L309.
8. *Дүйсебаев А.Д. и др.* // *ЯФ.* 2003. Т. 66, №4. С. 1–13.
9. *Ahmedov A. et al.* // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 2003. V. 29, No. 3. P. 521–529.
10. *Лукьянов В. К. и др.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2003. Т. 67, № 1. С. 55–61.
11. *Лукьянов В. К. и др.* // Там же. №5. С. 717–721.
12. *Suzko A. A.* // *Phys. Lett. A.* 2003. V. 308. P. 267–279.
13. *Nieto L. M., Samsonov B. F., Suzko A. A.* // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2003. V. 36. P. 12293–12301.
14. *Voskresenskaya O.* // *J. Phys. B: At. Mod. Opt. Phys.* 2003. V. 36. P. 3293–3302.
15. *Blaschke D. et al.* // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 2003. V. 149. P. 182–189;
Costa P., Ruivo M. C., Kalinovsky Yu. L. // *Phys. Lett. B.* 2003. V. 577. P. 129–136.
16. *Costa P., Ruivo M. C., Kalinovsky Yu. L.* // *Ibid.* V. 560. P. 171–177.
17. *Bastrukov S. I. et al.* // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 2003. V. 29. P. 683.
18. *Гердт В. П., Янович Д. А.* // *Программирование.* 2003. Т. 29, №2. С. 72–74.
19. *Корняк В. В.* // Там же. С. 94–99;
Kornyak V. V. // *Computer Algebra in Scientific Computing (CASC'2003), Garching, 2003.* P. 227–240.
20. *Antonioni I. et al.* // *Chaos, Solitons & Fractals.* 2004. V. 19. P. 731–737;
Akishina E. P. et al. // *Chaos, Solitons & Fractals.* 2003. V. 18. P. 1111–1128;
Antonoiu I. et al. // *WSEAS Transactions Comp.* 2003. V. 2, issue 4. P. 1061–1066.
21. *Hayryan S. et al.* // *J. Comp. Chem.* 2003 (in press);
Busa J. et al. // *Comp. Phys. Commun.* 2003 (in press).
22. *Hayryan S. et al.* // *Lecture Notes Comp. Sci. Publish.* 2003. V. 2657. P. 54–62.
23. *Blinkov Yu. A. et al.* // *Computer Algebra in Scientific Computing (CASC'2003), Garching, 2003.* P. 31–40;
Blinkov Yu. A. et al. // *Ibid.* P. 41–54.
24. *Znojil M., Yanovich D., Gerdt V.* // *J. Phys A: Math. Gen.* 2003. V. 36. P. 6531–6545;
Gerdt V., Znojil M., Yanovich D. // *Computer Algebra in Scientific Computing (CASC'2003), Garching, 2003.* P. 143–162.